N° d'ordre :
1692

N° C.N.R.S.
A.O. 13217

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Annik BACHELIER-CARLIER

LABORATOIRE AIMÉ COTTON
C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

CLASSIFICATION SU_3 des OPERATEURS EFFECTIFS ELECTROSTATIQUES à 3 PARTICULES pour les CONFIGURATIONS $(d+s)^N$.
CONTRIBUTION à la DETERMINATION des COEFFICIENTS de CLEBSCH - GORDAN des GROUPES de LIE SEMI-SIMPLES COMPACTS.

SOUTENUE LE 23 Juin 1976 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

P. JACQUINOT ..... : Président

B. R. JUDD .....
R. ARVIEU .....
S. FENEUILLE ..... } Examinateurs
L. DACIC .....

N° d'ordre :
1692

N° C.N.R.S.
A.O. 13217

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Annik BACHELIER-CARLIER

LABORATOIRE AIMÉ COTTON
C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

CLASSIFICATION SU_3 des OPERATEURS EFFECTIFS ELECTROSTATIQUES à 3 PARTICULES pour les CONFIGURATIONS $(d+s)^N$.
CONTRIBUTION à la DETERMINATION des COEFFICIENTS de CLEBSCH - GORDAN des GROUPES de LIE SEMI-SIMPLES COMPACTS.

SOUTENUE LE 23 Juin 1976 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

P. JACQUINOT	Président
B. R. JUDD	Examinateurs
R. ARVIEU	
S. FENEUILLE	
L. DACIC	

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548124_0001

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I - GENERALITES 11

I) Théorie du champ central 12

A) 1er ordre de perturbations 13

a) Structure fine 13

b) Structure hyperfine 13

B) Effets de second-ordre 14

1°) Structure fine 14

2°) Structure hyperfine 17

II) Classification des groupes d'opérateurs linéaires .. 19

1°) Classification des groupes d'opérateurs linéaires 19

2°) Représentations des groupes linéaires - Lien avec le groupe symétrique 19

III) Généralités sur les groupes de Lie compacts 25

1°) Groupes de Lie continus 25

2°) Groupes de Lie semi-simples 26

3°) Représentations des algèbres de Lie des groupes semi-simples compacts 29

4°) Groupe $GL(\ell+1)$ et sous-groupes 33

5°) Produit de Kronecker de deux représentations .. 36

6°) Théorème de Wigner-Eckart général. 37

IV) Propriétés de symétrie - Pléthysmes 39

V) Application à la spectroscopie atomique 44

1°) Opérateurs tensoriels 45

2°) Classification des états ℓ^n -

Cas particulier de d^n 46

3°) Classification des états $(\ell+\ell')^n$ -

Classification SU_3 de $(d+s)^n$ 50

4°) Classification des opérateurs monoélectroniques 56

a) Cas des configurations ℓ^n 56

b) Cas des configurations $(\ell+\ell')^n$ - Cas de

$(d+s)^n$ dans le schéma SU_3 58

5°) Hermiticité des opérateurs tensoriels 60

6°) Principe de la classification des opérateurs

à 2 et 3 particules 63

a) Opérateurs biélectroniques dépendants du

spin agissant dans d^n 64

b) Opérateurs à 3 particules indépendants du

spin agissant dans $(d+s)^n$ 65

7°) Coefficients de Clebsch-Gordan et construction

explicite d'opérateurs à plusieurs

particules 67

VI) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan

des groupes semi-simples compacts 72

Principe général

CHAPITRE II - INTRODUCTION 77

1ère partie : Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan (C.C.G.) $SU_3 \supset R_3$ 84

I) C.C.G. intervenant dans l'expression des opérateurs à 2 et 3 particules. Tableaux des résultats 84

II) Propriétés de symétrie et dégénérescence externe 126

III) Liens entre l'hermiticité des opérateurs tensoriels couplés et la levée partielle des dégénérescences internes 128

1°) Hermiticité d'un opérateur tensoriel 128

2°) Opérateurs tensoriels couplés agissant dans R_3 129

3°) Conséquences pour les opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^n$ classés / $SU_3 \supset R_3$ 130

4°) Conjugaison hermitique pour un opérateur quelconque classé de $SU_3 \supset R_3$ 132

5°) Application aux opérateurs couplés classés dans $SU_3 \supset R_3$ 134

IV) Comparaison entre les différentes bases $SU_3 \supset R_3$ .. 146

1°) Problème de la caractérisation complète des vecteurs de base de SU_n 146

2°) Bases d'états définis par Judd, Miller, Patera, Winternitz 150

a) Expressions des L_i et T_j en fonction des V_q^1 et V_q^{+2} 150

b) Expression tensorielle de l'invariant $X^{(3)}$ 153

c) Etude de la base obtenue par diagonalisation de $X^{(3)}$ 155

d) Etude de l'invariant $X^{(4)}$ 157

3°) Conclusions de la discussion des états $SU_3 \supset R_3$ 164

2ème partie : Classification des opérateurs effectifs à 3 particules agissant dans $(d+s)^n$ 167

A) Classification formelle 167

1°) Nombre d'opérateurs symétriques 168

2°) Opérateurs symétriques et hermitiques 170

B) Détermination explicite des opérateurs 174

I) Cas $[(11)\otimes\{2\}](22)$ - 7 opérateurs 174

II) Cas $[(22)\otimes\{2\}](11)$ - 10 opérateurs 178

III) Cas $[(11)\otimes\{3\}]$ - 2 opérateurs 184

IV) Cas $[(22)\otimes\{3\}]$ - 15 opérateurs 186

1°) Séparation des parties hermitiques et antihermitiques 188

2°) Principe de la symétrisation 191

3°) Détermination explicite des opérateurs 196

4°) Tableau récapitulatif des 15 opérateurs $(22)\otimes\{3\}$ 209

C) Conclusions à propos de la détermination des 34 opérateurs à 3 particules 210

CHAPITRE III - CLASSIFICATION DES INTERACTIONS DE SECOND ORDRE DE STRUCTURE HYPERFINE DANS LES CONFIGURATIONS d^N 215

I) Position du problème 215

1°) Effets des interactions de configurations sur la structure hyperfine 215

2°) Expression des opérateurs effectifs dans le cas du terme croisé énergie coulombienne - structure hyperfine 216

3°) Discussion des résultats obtenus pour d^N par les méthodes usuelles - Intérêt de la classification des interactions étudiées par la théorie des groupes 219

II) Utilisation de la chaîne de réductions $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$ pour l'étude de d^N 220

A) Rappels sur la classification des états des configurations d^N et des opérateurs monoélectroniques 221

B) Classification formelle des interactions biélectroniques intervenant dans notre étude .. 223

1°) Opérateurs symétriques 223

2°) Détermination des opérateurs intervenant dans les corrections Δ_q , Δ_ℓ , Δ_{sc} 225

III) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $SO_5 \supset R_3$ 226

1°) Construction des systèmes linéaires 226

2°) Détermination des coefficients 228

Choix des solutions dans les cas

dégénérés 228

a) Comparaison des coefficients $(u_1\ u_2)$,

$(u_2\ u_1)$ et des carrés Kronecker 229

b) Vérifications des coefficients et

tableaux des résultats 231

IV) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan

$Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ 241

1°) Construction des systèmes linéaires 241

2°) Détermination des coefficients 244

a) Cas de l'échange $(\sigma_1\sigma_2)$, $(\sigma_2\sigma_1)$ et des

carrés Kronecker 245

b) Vérifications des coefficients et tableaux

des résultats 246

V) Classification des opérateurs biélectroniques 297

A) Opérateurs biélectroniques 297

1°) Etude des opérateurs couplés en

(xk) = (02) intervenant dans Δ_q 297

2°) Etude des opérateurs couplés en

(xk) = (01) intervenant dans Δ_ℓ 301

3°) Etude des opérateurs couplés en

(xk) = (12) intervenant dans Δ_{sc} 303

B) Etude des corrections Δ 304

CHAPITRE IV - CALCULS AUTOMATIQUES 313

1ère partie : Description de CLEGA1, programme de calcul des formules angulaires 313

Introduction 313

I) Notion sur la compilation algol des ordres arithmétiques 317

A) Production de la notation post-fixée 317

1°) Notation préfixée et postfixée 317

2°) Passage de la notation habituelle à la notation postfixée. Pile de mémoires 318

a) Expression complètement parenthésée .. 318

b) Expression non complètement parenthésée 320

B) Constitution du programme objet 321

II) Adaptation au cas du calcul d'une suite d'ordres arithmétiques sur des variables par un programme écrit en langage symbolique 326

III) Programmation d'une formule littérale angulaire quelconque 336

1°) Position du problème. Principe du codage 336

2°) Détermination des séquences 339

a) Construction des listes initiales 339

b) Construction de la suite d'ordres exécutables 342

3°) Décodage et rangement des renseignements concernant chaque $P_l = \sum_i \pi_i$ 345

a) Rangement des renseignements sur chaque Σ dans BAV(k) 345

b) Rangement des renseignements concernant chaque π_i dans BAG(i) 346

4°) Exécution de la formule - Simulation de la récursivité croisée 348

IV) Organisation générale du programme CLEGA1 357

1°) Introduction 357

2°) Forme des données 357

3°) Organigramme général de l'organisation des calculs 358

4°) Décodage 358

5°) Avancement des variables 361

2ème partie : Résolution des systèmes linéaires sous forme exacte : CLEGA2 369

I) Introduction 369

II) Principe général de la méthode de résolution choisie 370

1°) Mise en évidence des équations proportionnelles par triangularisation 370

2°) Résolution des systèmes : Principe général 371

3°) Résolution sous forme exacte - Rationnalisation des systèmes 372

a) Rationnalisation par rapport à la dernière colonne 373
b) Résolution des cas non dégénérés 373
c) Résolution des cas dégénérés 374
4°) Calculs sous forme exacte par un bloc d'"algèbre Rotenberg" double précision entière 375
a) Représentation des nombres en machine 375
b) Les nombres "Rotenberg" 376
III) Ecriture du programme CLEGA2 379
1°) Description générale 379
2°) Organigramme du programme principal et du sous-programme MULPLE qui traite la résolution des cas dégénérés 382
3°) Description du sous-programme COUPE qui sépare chaque système en sous-systèmes indépendants 385
IV) Conclusion de la 2ème partie 387

ANNEXE

- Liste des sous-programmes du bloc de résolution 393
A) S. P. principaux 393
B) Petits sous-programmes annexes 396
- Liste des sous-programmes du bloc d'algèbre Rotenberg D. P. entière 397

CONCLUSION GENERALE 399

REFERENCES par ordre alphabétique 409

APPENDICE I

Pléthysmes 1

APPENDICE II

Etude de $(d+s)^N$ à l'aide de la chaîne de réductions

$U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$ 1

INTRODUCTION

Après les travaux de Slater (1929) et le livre célèbre de Condon et Shortley (1935) qui ont formé la base de départ de la théorie des spectres complexes, les premiers travaux de Racah (1942, 1943) ont apporté une contribution majeure grâce à l'introduction de nouveaux concepts tels que opérateurs tensoriels, coefficients de parenté fractionnelle et séniorité, et ont permis l'étude en couplage intermédiaire et au premier ordre de perturbation de groupes de configurations déjà importants tels que $[d^n, d^{n-1}s, d^{n-2}s^2]$.

Grâce à une remarquable interprétation des résultats obtenus à l'aide de la théorie des groupes de Lie, Racah a pu alors classer les états des configurations f^n et déterminer les énergies coulombiennes correspondantes (1949). Enfin, reprenant le problème dans son ensemble, il a dégagé les processus mathématiques mis en oeuvre dans le traitement des configurations ℓ^n (1951).

Judd, par un exposé très clair dans son livre "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy" (1963), a rendu accessible l'ensemble des méthodes de Racah et permis aux classificateurs d'entreprendre l'étude des groupes de configurations complexes construites sur f^n

Elliott (1958) a montré que la méthode est suffisamment puissante pour être étendue systématiquement à la classification des configurations mélangées $(\ell+\ell')^n$ considérées comme une seule entité, et montré comment les états $(d+s)^n$ peuvent être classés suivant différentes chaînes de groupes, en particulier

$$U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SO_6 \supset SO_5 \supset R_3]$$

$$U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3] \quad .$$

L'hamiltonien du système noyau-électrons est bien connu et l'approximation du champ central au premier ordre permet généralement de rendre compte d'un grand nombre de données expérimentales au moyen d'un petit nombre de paramètres ajustables. Cependant, les interprétations des structures hyperfines ou des déplacements isotopiques, qui exigent une très bonne détermination préalable des fonctions d'onde, ont fait apparaître la nécessité d'estimer l'influence des ordres supérieurs de perturbation. Rajnak et Wybourne (1963, 1964) ont alors montré qu'on peut tenir compte des effets des interactions des configurations lointaines par l'introduction d'opérateurs effectifs à plusieurs particules et c'est Judd qui, grâce à l'introduction de la seconde quantification en spectroscopie atomique et à l'aide des diagrammes de Feynman, a donné au problème sa véritable solution (1967, 1970).

Le cas des configurations mélangées $(\ell+\ell')^n$ a été traité par S. Feneuille dans sa thèse (1967). Après avoir généralisé l'ensemble des concepts liés à la théorie des groupes introduits par Racah et

obtenu la classification des états et des opérateurs agissant au premier ordre dans $(\ell+\ell')^n$ à l'aide de la chaîne de réductions

$$U_{4(\ell+\ell'+1)} \supset SU_{4(\ell+\ell'+1)} \supset Sp_{4(\ell+\ell'+1)} \supset SU_2 \times$$

$$[SO_{2(\ell+\ell'+1)} \supset [SO_{2\ell+1}(R_3) \times SO_{2\ell'+1}(R_3)] \supset R_3] \ ,$$

il a étendu l'utilisation de la seconde quantification et des diagrammes de Feynman et déterminé ainsi la forme des opérateurs effectifs de second ordre agissant dans les configurations $(\ell+\ell')^n$.

Plusieurs conditions sont indispensables pour que l'introduction du second ordre dans les interprétations physiques ait un sens :

- D'une part, il faut pouvoir distinguer entre les interactions de configurations proches et lointaines, c'est-à-dire pouvoir définir et traiter des groupes de configurations bien isolées. C'est le cas par exemple des configurations $(d+s)^N$ des éléments de transition.

- D'autre part, il faut disposer de résultats expérimentaux suffisants pour déterminer un nombre de paramètres nettement plus élevé que pour le premier ordre et la taille des calculs doit rester raisonnable par rapport aux ordinateurs actuels.

- Enfin, la détermination des paramètres et l'abaissement de l'écart quadratique moyen entre les énergies expérimentales et calculées ne sont pas des critères suffisants : les facteurs de Landé et les interprétations des effets nucléaires sur les spectres atomiques sont des tests complémentaires essentiels d'amélioration des fonctions d'onde obtenues.

A tous ces points de vue les éléments de transition et notamment la série 3d représentent le cas idéal pour la confrontation théorie-expérience. On dispose de spectres bien classés, de mesures de structures hyperfines et de déplacements isotopiques à interpréter et de groupements de configurations relativement bien définis construits sur $(d+s)^N$.

Les calculs réalisés par J. Schrijver (1969) sur des configurations de la série du fer à l'aide des résultats de S. Feneuille sur la classification des états $(d+s)^N$ et la détermination des opérateurs à 3 particules (1967, 1969) ont été repris et étendus par J. Schrijver et Noorman (1972). Ces travaux montrent que l'introduction des effets de second ordre permet de réduire fortement l'écart quadratique moyen et que les interactions électrostatiques, représentées par 3 opérateurs à 2 particules et 8 opérateurs à 3 particules, sont beaucoup plus importantes que les interactions dépendant du spin. En outre, un calcul a été réalisé sur la configuration $3d^5 4p$ de Fe III par M. Aymar (1970), qui tient compte partiellement des effets de second ordre et qui montre non seulement l'importance des effets électrostatiques mais encore la nécessité, pour mener plus loin les calculs, de disposer de l'ensemble classé des opérateurs effectifs à 2 et 3 particules agissant dans $d^n p$.

Une étape importante serait donc de pouvoir aborder l'étude complète des configurations $(d+s)^N$ et $(d+s)^N p$ de la série du fer.

Or S. Feneuille et A. Crubellier (1970) ont montré que le schéma le plus intéressant pour étudier les configurations $(d+s)^N p^M$ est la chaîne de réductions

$$[SU_2(d,s) \times SU_2(p) \supset SU_2] \times [SU_3(d,s) \times SU_3(p) \supset SU_3 \supset R_3] .$$

Ils ont déterminé les opérateurs effectifs électrostatiques à 2 particules qui interviennent ; l'ensemble du travail nécessaire pour mener à son terme l'étude d'un cas physique à l'aide de ces nouveaux schémas de classification et évaluer l'importance des effets des opérateurs à 3 particules est considérable et nous avons limité notre attention à la détermination explicite à l'aide du schéma SU_3 des opérateurs effectifs électrostatiques à 3 particules agissant dans $(d+s)^N$.

Ce problème est complexe pour plusieurs raisons :

- La description des configurations $(d+s)^N$ à l'aide du groupe SU_3 est moins bien adaptée que la description"standard" de S. Feneuille. En particulier, alors que seuls interviennent au second ordre les opérateurs à 3 particules construits sur des produits $V^{k_1} V^{k_2} V^{k_3}$ où les k_i sont pairs, il est indispensable en SU_3 de construire l'ensemble de tous les opérateurs scalaires à 3 particules, opérateurs qui tiennent compte alors d'effets d'ordre supérieur dont l'importance pourrait en principe être mise en évidence par comparaison avec les résultats antérieurs de Schrijver.

- L'utilisation du groupe SU_3 n'est pas courante en physique atomique et les résultats intermédiaires utiles sont pratiquement inexistants. En particulier les très nombreux coefficients de Clebsch-Gordan

$SU_3 \supset R_3$ nécessaires à la classification des opérateurs doivent être déterminés. L'importance des calculs à effectuer dépasse très largement les possibilités manuelles et l'écriture d'un ensemble de programmes a été entreprise pour permettre de calculer, à partir d'une méthode proche de celle de Nutter et Nielson (1963), les coefficients de Clebsch-Gordan des groupes de Lie semi-simples compacts dans leurs réductions successives à R_3 .

- Surtout, les indéterminations des états de base, inhérentes aux réductions successives qui interviennent, entraînent des problèmes complexes de dégénérescences internes et externes. Dans le cas de SU_3 ce problème revêt un caractère particulier. Finalement l'ensemble de ce travail est consacré essentiellement à 3 points principaux : le premier est la détermination explicite, dans le schéma SU_3 , d'un ensemble complet d'opérateurs à 3 particules, scalaires, hermitiques, symétriques et indépendants du spin, représentant les effets électrostatiques des interactions de configurations lointaines sur les configurations $(d+s)^N$. Le deuxième point est une discussion, à propos de la détermination des C.C.G. de la réduction $SU_3 \supset R_3$, sur la possibilité de diminuer la dégénérescence interne grâce au choix d'opérateurs tensoriels couplés possédant des propriétés d'hermiticité définies. Ce choix définit une base d'états $SU_3 \supset R_3$ que nous comparons avec celle proposée par Judd, Miller, Patera, Winternitz (1974). Le troisième point est la réalisation d'un ensemble de deux programmes permettant le calcul automatique des C.C.G. des groupes de Lie semi-simples compacts dans leurs réductions successives à R_3 , aux indéterminations

près dues aux dégénérescences. Dans ce cas p solutions arbitraires orthonormées sont déterminées qu'on peut combiner linéairement entre elles suivant le problème particulier traité.

Cette réalisation, indispensable pour déterminer les C.C.G. $SU_3 \supset R_3$ nécessaires à la classification des opérateurs à 3 particules, nous a permis en outre de participer à un travail parallèle faisant appel aux mêmes méthodes. A la suite des remarques de Cl. Bauche-Arnoult, qui a étudié dans sa thèse (1972) les effets de corrélation sur la structure hyperfine des configurations d^N, nous avons entrepris la classification, dans le schéma $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$, des opérateurs effectifs à 2 particules dépendant du spin et venant du terme de second ordre croisé de l'énergie coulombienne et de la structure hyperfine.

PLAN CHAPITRE I - GENERALITES

I) Théorie du champ central.

A) 1er ordre de perturbations.

a) Structure fine.

b) Structure hyperfine.

B) Effets de second-ordre.

1°) Structure fine.

2°) Structure hyperfine.

II) Classification des groupes d'opérateurs linéaires.

1°) Classification des groupes d'opérateurs linéaires.

2°) Représentations des groupes linéaires - Lien avec le groupe symétrique.

III) Généralités sur les groupes de Lie compacts.

1°) Groupes de Lie continus.

2°) Groupes de Lie semi-simples.

3°) Représentations des algèbres de Lie des groupes semi-simples compacts.

4°) Groupe $GL(\ell+1)$ et sous-groupes.

5°) Produit de Kronecker de deux représentations.

6°) Théorème de Wigner-Eckart général.

IV) Propriétés de symétrie - Pléthysmes.

V) Application à la spectroscopie atomique.

1°) Opérateurs tensoriels.

2°) Classification des états ℓ^n - Cas particulier de d^n .

3°) " " $(\ell+\ell')^n$ - Classification SU_3 de $(d+s)^n$.

4°) Classification des opérateurs monoélectroniques.

a) Cas des configurations ℓ^n .

b) Cas des configurations $(\ell+\ell')^n$ - Cas de $(d+s)^n$ dans le schéma SU_3 .

5°) Hermiticité des opérateurs tensoriels.

6°) Principe de la classification des opérateurs à 2 et 3 particules.

a) Opérateurs biélectroniques dépendants du spin agissant dans d^n .

b) Opérateurs à 3 particules indépendants du spin agissant dans $(d+s)^n$.

7°) Coefficients de Clebsch-Gordan et construction explicite d'opérateurs à plusieurs particules.

VI) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan des groupes semi-simples compacts.

Principe général.

CHAPITRE I

GENERALITES.

Dans ce chapitre nous faisons, sur la théorie du champ central, quelques rappels nécessaires pour situer le sujet de ce travail et introduire la notion d'interactions effectives. L'étude de ces interactions à l'aide des groupes de Lie semi-simples compacts et des propriétés de symétrie fait appel à des notions de base qu'il n'est pas possible d'expliciter ici et nous donnons simplement un aperçu sur la façon dont elles s'introduisent, principalement afin de présenter le vocabulaire utilisé. Après des rappels très succincts sur la théorie des groupes de Lie puis sur les propriétés de symétrie de permutations nous donnons l'application de ces résultats à la classification formelle des états et des opérateurs à 1, 2 et 3 particules dans les configurations ℓ^N et $(\ell+\ell')^N$ puis nous présentons le principe de la méthode utilisée pour déterminer les coefficients de Clebsch-Gordan des groupes semi-simples nécessaires, en particulier, à la classification explicite des interactions à 2 et 3 particules.

I. Théorie du champ central.

L'hypothèse du champ central consiste à écrire l'hamiltonien H d'un atome à N électrons sous la forme d'une somme de deux hamiltoniens H_0 et H dans lesquels on a fait apparaître une fonction $u(r)$ appelée potentiel central. On a alors $H' = H_0 + H$ où

$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} + u(r_i)\right]$ est l'hamiltonien principal et

$H = \sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^{N} \left[\xi(r_i)\, \underset{\sim}{s}_i . \underset{\sim}{\ell}_i - u(r_i)\right]$ un hamiltonien que l'on traite par la méthode des perturbations.

$u(r)$ représente le potentiel moyen dans lequel se déplace chaque électron mais son introduction est en fait un artifice de calcul et sa détermination est arbitraire.

Les valeurs propres de H_0 représentent les énergies des configurations caractérisées par les nombres quantiques n et ℓ de chaque électron. On a $H_0\, \psi = E\, \psi$ avec $E = \sum_i E_i(n_i \ell_i)$. Les fonctions propres ψ de H_0 sont données par les déterminants $\{\varphi_1 \ldots \varphi_N\}$ où

$\varphi_j(k_i) = \frac{R(n_i \ell_i)}{r_j}\, Y_{\ell_i m \ell_i}(\theta_j \varphi_j)\, \delta(\sigma_j m s_i)$ est une fonction d'onde monoélectronique. Elles permettent de construire des bases de fonctions antisymétriques nécessaires à l'étude des différents ordres de perturbations.

A) Ordre 1 : Structure fine et structure hyperfine.

a) Structure fine - Niveaux d'énergie.

L'hamiltonien perturbateur H comporte 3 parties :

- l'interaction électrostatique entre électrons $Q = \Sigma \frac{e^2}{r_{ij}}$
- l'interaction de spin-orbite $\Lambda = \Sigma \xi(r_i) s_i \ell_i$ où $\xi(r) = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r} \frac{du}{dr}$
- une partie purement radiale que nous noterons u' .

A l'ordre 1 on étudie l'action de H perturbateur sur la configuration ou l'ensemble de configurations proches considérées. On diagonalise donc la matrice de $Q+u'+\Lambda$ sur les états considérés. La très forte dégénérescence de l'ordre 0 est levée et la configuration se sépare en niveaux d'énergie : c'est ce qu'on appelle obtenir le couplage intermédiaire de cette configuration.

b) Structure hyperfine.

Si l'on s'intéresse à une analyse plus fine de la structure des niveaux, des termes s'ajoutent à l'hamiltonien H . Parmi ceux-ci, l'hamiltonien H_{hfs} de structure hyperfine comporte 4 termes principaux qui décrivent les interactions entre les moments nucléaires magnétiques et électriques et les champs magnétiques et électriques produits par les électrons et qui s'écrivent sous forme tensorielle

- 1) Partie orbitale $\alpha \left\{ \Sigma_i \frac{1}{r_i^3} \underset{\sim}{\ell}_i^{(1)} \right\} . \underset{\sim}{I}^{(1)}$
- 2) Partie spin-dipolaire $\alpha \left\{ \Sigma_i \frac{1}{r_i^3} (-\sqrt{10}\, \underset{\sim}{s}^{(1)} \underset{\sim}{C}^{(2)})^{(1)} \right\} . \underset{\sim}{I}^{(1)}$

- 3) Terme de contact $\alpha \left\{ \sum_i \frac{8\pi}{3} \delta(\underset{\sim}{r}_i) \, \underset{\sim}{s}_i^{(1)} \right\} . \underset{\sim}{I}^{(1)}$

. Terme quadrupolaire électrique $\beta \sum_i \frac{1}{r_i^3} (\underset{\sim}{C}_i^{(2)} . \underset{\sim}{K}^{(2)})$.

L'ensemble de ces notations a été défini par Cl. Bauche dans sa thèse (1972). Au premier ordre il faudrait diagonaliser $Q+\Lambda+u'+H_{hfs}$ mais ce n'est pas ce qui est réalisé pratiquement : on reprend la plage intermédiaire obtenu et on calcule les éléments de matrice de H_{hfs} sur cette base (les éléments non diagonaux de la matrice de H_{hfs} sont considérés comme négligeables).

B) Effets de second ordre.

1°) Correction sur la structure fine.

Au second ordre l'influence des états $|\phi_n\rangle$ d'une configuration perturbatrice d'énergie E_n entraîne sur la structure fine de la configuration étudiée la correction suivante :

$$\delta E = \sum_n \frac{\langle \phi_0 | Q+u'+\Lambda | \phi_n \rangle \langle \phi_n | Q+u'+\Lambda | \phi_0 \rangle}{E_0 - E_n} \quad . \qquad (1)$$

Cette expression où apparaît une somme sur tous les états de la configuration perturbatrice considérée n'est pas utilisable telle quelle mais on montre qu'on peut définir des opérateurs effectifs scalaires n'agissant qu'à l'intérieur de la configuration étudiée qui permettent d'ignorer le détail des propriétés des configurations perturbatrices. L'expression (1) s'écrit alors

$$\langle \phi_0 | \Omega | \phi_0 \rangle \quad \text{où} \quad \Omega = \sum_n - \frac{1}{\Delta E} H | \phi_n \rangle \langle \phi_n | H \quad .$$

En développant, il apparaît les termes :

$$\Omega_1 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n u'|\phi_n\rangle\langle\phi_n|u' \qquad \text{noté symboliquement} \quad u'u'$$

$$\Omega_2 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n Q|\phi_n\rangle\langle\phi_n|Q \qquad " \qquad QQ$$

$$\Omega_3 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n Q|\phi_n\rangle\langle\phi_n|u' + u'|\phi_n\rangle\langle\phi_n|Q \qquad " \qquad Qu'+u'Q$$

$$\Omega_4 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n \Lambda|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Lambda \qquad " \qquad \Lambda\Lambda$$

$$\Omega_5 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n \Lambda|\phi_n\rangle\langle\phi_n|Q + Q|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Lambda \qquad " \qquad \Lambda Q+Q\Lambda$$

$$\Omega_6 = -\frac{1}{\Delta E}\sum_n \Lambda|\phi_n\rangle\langle\phi_n|u' + u'|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Lambda \qquad " \qquad \Lambda u'+u'\Lambda$$

Les trois premiers termes agissent uniquement sur l'orbite des électrons. Ils forment ce qu'on appelle les interactions effectives électrostatiques de second ordre. Les trois autres agissent simultanément sur le spin et l'orbite et n'interviendront pas dans notre étude. La détermination effective des opérateurs Ω a été faite à l'aide de la méthode de seconde quantification par Judd dans la cas des configurations ℓ^N (1967, 1970) et par Feneuille dans le cas des configurations $(\ell+\ell')^N$ (1967).

Pour les configurations ℓ^N, Ω peut être écrit en fonction d'opérateurs tensoriels sous la forme

$$\Omega = \sum_k X^k \sum_{i>j} (v_i^k . v_j^k) + \lambda \sum_i w_i^{(11)0} + \sum_{kk'k''\,\text{pairs}} T(kk'k'') \sum_{i\neq j\neq h} (\{v_i^k v_j^{k'}\}^{k''} . v_h^{k''})$$

$$+ \sum_{k\ \text{pair}} Y^k \sum_{t\ \text{impair}} [t] \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ \ell & \ell & \ell \end{Bmatrix} \sum_{i>j} (w_i^{(0k)k} . w_j^{(1t)k})$$

Les expressions des intégrales radiales X^k , $T^{kk'k''}$, Y^k sont assez compliquées mais c'est sans importance dans une étude semi-empirique où elles sont considérées comme paramètres ajustables.

Les deux premiers termes ont même dépendance angulaire que l'hamiltonien H . On voit apparaître ensuite, des opérateurs à 2 particules qui recouvrent en fait les corrections empiriques de Trees (1951) des opérateurs à 3 particules dont on peut réduire le nombre par l'étude de leurs propriétés de symétrie, enfin des opérateurs à 2 particules agissant sur le spin et l'orbite.

La forme de Ω dans le cas des configurations $(\ell+\ell')^N$ est beaucoup plus complexe mais on trouve des résultats très semblables, c'est-à-dire un ensemble d'interactions à 2 et 3 particules du type

$$\sum_k X(k) \sum_{i>j} (v_i^k(\ell_a \ell_c).v_j^k(\ell_d \ell_f))$$

$$\sum_{k \text{ pair}} Y^k \sum_t \begin{Bmatrix} 1 & k & t \\ \ell_a & \ell_c & \ell_d \end{Bmatrix} \sum_{i\neq j} w_i^{(0k)k}(\ell_a \ell_c).w_j^{(1t)k}(\ell_d \ell_f)[t]$$

$$\sum_{kk'k''} T^{kk'k''} \sum_{i\neq j\neq h} (\{v_i^k(\ell_a \ell_b)\, v_j^{k'}(\ell_c \ell_d)\}^{k''}.v_h^{k''}(\ell_e \ell_f))$$

où les opérateurs $w^{xk}(\ell\ell')$ ont été définis par Feneuille (1967). Ainsi, dans le cas des configurations $(d+s)^N$, l'étude des propriétés de transformations des opérateurs dans les opérations des groupes Sp_{12} , SO_6 , SO_5 a permis à Feneuille (1967) de montrer qu'une fois écartés les opérateurs à 2 corps déjà présents dans l'interaction coulombienne à l'intérieur de $(d+s)^N$, les opérateurs électrostatiques à 2 corps restants peuvent être remplacés par 3 opérateurs très simples et que les opérateurs à 3 particules se réduisent à 8 opérateurs indépendants.

Comme nous l'avons précisé dans l'introduction, un des travaux exposés dans cette thèse est la classification des interactions à 2 et 3 particules introduites par les effets de second-ordre sur les configurations $(d+s)^N$ mais à l'aide cette fois du groupe SU_3

2°) Corrections sur la structure hyperfine.

Au deuxième ordre l'influence des états ψ_n d'une configuration perturbatrice entraîne de la même façon sur la structure hyperfine une correction

$$\delta E = \sum_n \frac{\langle\psi_0|H+H_{hfs}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|H+H_{hfs}|\psi_0\rangle}{E_0 - E_n} \quad \text{avec} \quad H = u'+\Lambda+Q$$

où il apparaît en notation symbolique les 4 termes

1) $H_{hfs}\ H_{hfs}$

2) $u'H_{hfs}+H_{hfs}u'$

3) $\Lambda H_{hfs}+H_{hfs}\Lambda$

4) $QH_{hfs}+H_{hfs}Q$

- Le premier terme décrit l'interaction entre les structures hyperfines de niveaux appartenant à des configurations différentes et son effet est analogue à celui dû aux éléments de matrice non diagonaux de H_{hfs} On le néglige.

- Le deuxième terme, où l'opérateur u' est purement radial, n'intervient pas ; il est traité dans le premier ordre.

- Le troisième terme, qui est l'interaction croisée spin-orbite-structure hyperfine et introduit des opérateurs effectifs compliqués dépen-

dant du spin, n'a jamais été étudié car il a été considéré comme représentant une correction en général plus faible que le

Quatrième terme, interaction croisée énergie coulombienne-structure hyperfine, qui est le terme étudié en détail par Cl. Bauche (1972) et celui qui nous intéresse ici. La méthode de seconde quantification a permis à Cl. Bauche d'expliciter la forme des opérateurs effectifs correspondant à cette correction pour les configurations ℓ^N et $(\ell+\ell')^N$, comme nous le verrons dans le chapitre III qui est consacré à l'étude de la classification de ces interactions effectives dans le cas des configurations d^N à l'aide de la chaîne de groupe standard $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$.

II. Classification des groupes d'opérateurs linéaires - Représentations.

Ces quelques rappels n'ont pour but que de présenter les différents groupes d'opérateurs linéaires utilisés en physique atomique et d'essayer de montrer comment s'introduisent les liens entre les groupes de transformations linéaires et le groupe des permutations. On trouvera un exposé détaillé dans le livre de Bacry par exemple (1967).

1°) Classification des groupes d'opérateurs linéaires.

Rappelons qu'un opérateur régulier A agissant dans un espace métrique E et conservant le produit scalaire est dit isométrique. C'est-à-dire qu'il vérifie $(Ax,Ay) = (x,y)$, $\bar{A}A = 1_E = A\bar{A}$ soit $A^{-1} = \bar{A}$ où $\bar{A}$ est l'adjoint de A .

Un tel opérateur est dit -orthogonal pour un espace euclidien

-unitaire " hermitique

-pseudo orthogonal " pseudo-euclidien

-pseudo unitaire " pseudo-hermitique

-symplectique " symplectique

où l'on rappelle que les différents espaces sont définis par les propriétés du tenseur métrique g :

- Si la métrique g est antisymétrique soit $(x,y) = -(x,y)_t = -g^t y(x)$ l'espace est dit"symplectique". Il est toujours de dimension paire.

- Si la métrique g est symétrique soit $(x,y) = (x,y)_t = g^t y(x)$ on peut choisir les $g_{ij}=0$ et les $g_{ii}=\pm 1$. Si on appelle (p,m) la

signature de la métrique on a les 4 cas suivants :

métrique g symétrique $(x,y)=(x,y)_t$	si g linéaire $(x,y)=(y,x)_t$	si g antilinéaire $(x,y)=(y,x)^*_t$
Si p ou $m=0$	Espace euclidien	Espace hermitique
Si p et $m\neq 0$	Espace pseudo-euclidien	Espace pseudo-hermitique

On montre que les opérateurs isométriques d'un espace métrique forment un groupe et les principaux groupes d'opérateurs linéaires agissant dans les différents espaces et formant des groupes matriciels sont :

$GL(n,C)$, (n,R) } Groupe linéaire complet des matrices complexes $n\times n$ régulières réelles

$SL(n,C)$, (n,R) } Les mêmes avec la restriction unimodulaire (déterminant $=1$)

$U(p,m)$, $SU(p,m)$ } Groupe des matrices pseudo-unitaires $(p+m)\times(p+m)$ et l'unimodulaire correspondant.

$U(n,o) \equiv U(o,n) = U(n)$, $SU(n,o) \equiv SU(o,n) = SU(n)$ } Groupe unitaire à n dimensions ou groupes des matrices unitaires $(n\times n)$ et l'unimodulaire correspondant.

$O(p,m)$, $SO(p,m)$ } Groupe des matrices pseudo-orthogonales $(p+m)\times(p+m)$ et son unimodulaire.

$O(n)$, $SO(n)$ } Groupe des matrices orthogonales $(n\times n)$ et l'unimodulaire appelé souvent groupe des rotations, noté parfois R_n. Nous conservons la notation R_3 pour le groupe $SO(3)$ qui est effectivement le groupe des rotations à 3 dimensions.

$Sp(2n,C)$, $(2n,R)$ } Groupe des matrices symplectiques complexes $2n\times 2n$ réelles

$Sp(2n)$ Groupe symplectique unitaire ou simplement "groupe symplectique".

2°) Représentations des groupes d'opérateurs linéaires et lien avec le groupe symétrique.

a) Représentation conjuguée et contragrédiente .

Considérons une représentation $D(g)$. On peut remplacer chaque élément de matrice par son imaginaire conjugué. On obtient une nouvelle représentation appelée conjuguée et notée $D^*(g)$ soit $(D^*)_{k\ell} = D^*_{k\ell}$. On peut aussi transposer les matrices $D(g)$ soit $(D^t)_{k\ell} = D_{\ell k}$. Les deux opérations précédentes définissent la représentation adjointe $(D^\dagger)_{k\ell} = (D^\dagger)^t = D^*_{\ell k}$. Enfin on obtient deux autres représentations en transposant les inverses de D et D^* soit D^{-1t} appelée contragrédiente de D et $(D^{*t})^{-1} = (D^\dagger)^{-1}$ contragrédiente de D^* . On montre que D , D^* , D^{-1t} et $D^{\dagger -1}$ sont en même temps réductibles ou irréductibles, unitaires ou non et que D est réelle si elle coïncide avec sa conjuguée $(D = D^*)$.

b) Représentations du groupe symétrique Sp - Représentations associées.

Les représentations irréductibles du groupe des permutations Sp sont caractérisées par un diagramme d'Young à p cases (cf. Appendice 1). On appelle tableau standard un diagramme d'Young où sont inscrits les nombres de 1 à p dans l'ordre croissant dans chaque ligne et chaque colonne. On appelle symétriseur l'opérateur $S = \sum_{\sigma \in Sp} \sigma$ et antisymétriseur $A = \sum_{\sigma \in Sp} \chi(\sigma)\sigma$ où χ est la parité de la permutation σ . A chaque tableau d'Young on peut faire correspondre un opérateur

$\mathcal{Y}$ défini de la façon suivante : si p désigne les permutations des nombres du tableau laissant les lignes invariantes et q celles des colonnes, on définit le symétriseur $\mathcal{P} = \sum_p p$ et l'antisymétriseur $Q = \sum_q \chi(q) q$, alors $\mathcal{Y} = \mathcal{Q}\mathcal{P}$. En particulier à $|\overline{1}|\ldots|\overline{p}|$ correspond $\mathcal{Y} = S$ et à $\begin{vmatrix}\overline{1}\\ \vdots \\ \overline{p}\end{vmatrix}$ correspond $\mathcal{Y} = A$. Deux diagrammes se déduisant l'un de l'autre en permutant les lignes et les colonnes correspondent à 2 représentations de Sp de même dimension et dites représentations associées.

c) Tenseurs irréductibles de $GL(n)$, $SL(n)$, $SU(n)$.

Considérons le groupe de transformations linéaires $GL(n)$ dans un espace V_n . Soit $x \in V_n$ de composantes x^i et A une transformation de $GL(n)$. On a $x' = Ax$ ou $x'^i = A^i_j x^j$. On peut définir un tenseur de rang r par rapport au groupe $GL(n)$. Si les vecteurs x sont transformés par A les n^r quantités $x^{i_1}_{(1)}\ldots x^{i_r}_{(r)}$ $(i_\mu = 1\ldots n$, $\mu = 1,\ldots r)$ formées à partir de r vecteurs $x_{(1)}\ldots x_{(r)}$ de V_n se transforment comme $x'^{i_1}_{(1)}\ldots x'^{i_r}_{(r)} = A^{i_1}_{j_1}\ldots A^{i_r}_{j_r} x^{j_1}_{(1)}\ldots x^{j_r}_{(r)}$. Le tenseur F de rang r est décrit dans une base donnée par n^r composantes $F^{i_1\ldots i_r}$ qui se transforment comme le produit de r vecteurs $F'^{i_1\ldots i_r} = A^{i_1}_{j_1}\ldots A^{i_r}_{j_r} F^{j_1\ldots j_r}$. Donc la transformation A dans V_n induit la transformation $Ax\ldots xA = A^{\otimes r}$ dans l'espace $V_n^{\otimes r}$ des tenseurs de rang r . Si $x_1 \otimes \ldots \otimes x_r$ est un élément de $V_n^{\otimes r}$ et σ une permutation $(i_1\ldots i_p)$ de Sp de parité $\chi(\sigma)$, l'opérateur $\hat{\sigma}(x_1 \otimes \ldots \otimes x_r) = x_{i_1} \otimes \ldots \otimes x_{i_r}$ est un opérateur linéaire sur $V_n^{\otimes r}$ et on

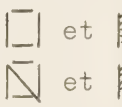
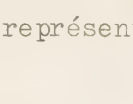
peut définir $\hat{S} = \sum_{\sigma \in Sp} \hat{\sigma}$ opérateur de symétrisation et $\hat{A} = \sum_{\sigma \in Sp} \chi(\sigma)\hat{\sigma}$ opérateur d'antisymétrisation. Les espaces $\hat{S}V_n^{\otimes r}$ et $\hat{A}V_n^{\otimes r}$ sont appelés espaces des tenseurs symétriques et antisymétriques. D'une façon générale on montre que les tenseurs de rang r peuvent être construits de manière à posséder un type de symétrie déterminé par rapport aux opérations du groupe symétrique S_r et qu'alors ils forment une base pour une représentation irréductible de $GL(n)$.

Autrement dit ils forment des tenseurs irréductibles de $GL(n)$ et le même diagramme d'Young caractérise alors soit la partition qui détermine la façon dont les composantes du tenseur se transforment par rapport à S_r , soit la représentation irréductible de $GL(n)$ dont elles forment une base.

On montre que les représentations irréductibles de $GL(n)$ restent irréductibles dans les réductions à $SL(n)$, $U(n)$, $SU(n)$.

d) Représentations irréductibles de $GL(n)$, $SL(n)$, $SU(n)$.

Si x est un vecteur de V_n et Φ un élément de l'espace dual $\mathcal{V}_n$ un opérateur régulier A est tel que $A^{-1t}\Phi(Ax) = A^t A^{-1t}\Phi(x) = \Phi(x)$. Donc A induit sur le dual une transformation A^{-1t} en général pas équivalente à A . Si on représente par $|\square|$ la représentation d'espace V_n (ou espace des kets $|x\rangle$) et par $\boxed{}$ sa contragrédiente d'espace $\mathcal{V}_n$ (ou espace des bra $\langle x|$) on montre pour $SL(n)$ l'équivalence des représentations associées aux diagrammes $\begin{matrix}\boxed{}\\ \vdots \\ \boxed{}\end{matrix}(r)$ et

$(n-r)$. On peut donc associer à tout tenseur antisymétrique de rang r sur V_n un tenseur covariant de rang $(n-r)$ sur le dual appelé tenseur adjoint. Il s'ensuit que pour $SL(n)$ les représentations $[\lambda_1 \ldots \lambda_n]$ et $[\lambda_1+p \ldots \lambda_n+p]$ sont équivalentes. Les diagrammes associés à $SL(n)$ sont donc des diagrammes à $(n-1)$ lignes. On montre aussi que la représentation contragrédiente d'une représentation $[\lambda_1 \ldots \lambda_{n-1} 0]$ de $SL(n)$ est la représentation $[\lambda_1, \lambda_1-\lambda_{n-1}, \ldots \lambda_1-\lambda_2, 0]$. Graphiquement les diagrammes de ces deux représentations forment un rectangle de n lignes : . SU_n étant un sous-groupe de $SL(n)$ cette propriété reste vraie. Enfin on montre que les représentations  sont équivalentes pour $SU(n)$ où  sont les représentations conjuguées de .

En résumé, pour SU_n la représentation conjuguée est équivalente à la contragrédiente. Une représentation de SU_n et sa conjuguée forment un rectangle de n lignes et les diagrammes utiles possèdent au plus $(n-1)$ lignes.

III. Généralités sur les groupes de Lie compacts.

Ces quelques rappels s'appuient sur l'exposé de Racah (1951) et essaient d'introduire certaines notions intervenant directement dans l'application des groupes de Lie à la spectroscopie atomique.

1°) Groupes de Lie continus.

Considérons un ensemble de transformations des vecteurs d'un espace vectoriel à n dimensions dépendant continûment de r paramètres indépendants, $y^i = f^i(x^1 \ldots x^n, a^1 \ldots a^r)$. Si on se limite à des transformations infinitésimales, l'ensemble des transformations du groupe est réalisé à l'aide de r opérateurs différentiels $X_\rho = \sum_i \frac{\partial f^i}{\partial a^\rho} \frac{\partial}{\partial x^i}$. La condition nécessaire et suffisante pour que r opérateurs X_ρ soient les opérateurs infinitésimaux d'un groupe d'ordre r est que leurs commutateurs vérifient $\boxed{[X_\rho, X_\sigma] = \sum_\tau c^\tau_{\rho\sigma} X_\tau}$ (1) relation qu'on peut écrire suivant la convention d'Einstein sur les indices répétés $[X_\rho, X_\sigma] = c^\tau_{\rho\sigma} X_\tau$. Les $c^\tau_{\rho\sigma}$ sont des tenseurs appelés constantes de structure de groupe et les relations (1) définissent une algèbre de Lie dont les éléments sont les X_ρ .

- Groupe abélien : un groupe est dit abélien si tous ses éléments commutent. En conséquence : $c^\tau_{\rho\sigma} = 0 \quad \forall \rho, \sigma$.

- Sous-groupe : c'est un sous-groupe caractérisé par p opérateurs $X_1 \ldots X_p$ formant eux-mêmes les opérateurs infinitésimaux d'un groupe. Les constantes de structure vérifient dont $c^\tau_{\rho\sigma} = 0 \quad (\rho, \sigma \leqslant p \ , \ \tau > p)$.

- Sous-groupe invariant : un sous-groupe H de G est invariant s'il contient tous les conjugués de ses éléments. Si $X_1 \ldots X_p$ sont les opérateurs infinitésimaux de H les constantes de structures vérifient $c^{\tau}_{\rho\sigma} = 0 \quad (\rho \leqslant p \ , \ \tau > p)$.

- Groupe de Lie simple : Il ne contient pas de sous-groupe de Lie invariant autre que l'unité.

- Groupe de Lie semi-simple ; la condition est moins restrictive. Il ne contient pas de sous-groupe de Lie invariant abélien autre que l'unité.

2°) Groupes de Lie semi-simples.

Si on considère le tenseur symétrique de rang 2, $g_{\rho\sigma} = c^{\mu}_{\rho\lambda} c^{\lambda}_{\sigma\mu}$ (convention d'Einstein), alors, pour qu'un groupe de Lie soit semi-simple il faut et il suffit que le déterminant $|g_{\rho\sigma}|$ soit $\neq 0$. Le tenseur $g_{\rho\sigma}$ peut donc servir de tenseur métrique de l'algèbre et permet de définir le produit scalaire de deux opérateurs. La classification des groupes de Lie semi-simples consiste à mettre les relations de commutation sous forme standard, c'est-à-dire consiste à chercher des opérateurs, combinaisons linéaires des X_τ , de façon que ces combinaisons aient, avec l'une d'entre elles A fixée, des relations de commutation du type $[A,X] = \rho X$ caractéristiques du groupe. On montre qu'on peut trouver A de façon que ℓ combinaisons linéaires, c'est-à-dire ℓ opérateurs H_i commutent entre eux deux à deux. La racine $\rho=0$ est donc ℓ fois dégénérée et c'est la seule racine

multiple. ℓ est appelé le rang du groupe semi-simple. Il existe $r-\ell$ autres racines distinctes et nous notons les opérateurs correspondants $E_\alpha \ldots E_\gamma$. Alors :

$$[A,H_i] = 0 \qquad (i = 1 \ldots \ell)$$

$$[A,E_\alpha] = \alpha\, E_\alpha \qquad (r-\ell \text{ indices grecs})$$

où les $\begin{cases} H_i \\ E_\alpha \end{cases}$ sont des combinaisons des X_τ (" " ")

et $A = \lambda^i H_i$.

Finalement les résultats de la classification, c'est-à-dire les formes standard que prennent les relations de commutation des opérateurs infinitésimaux des groupes de Lie semi-simples, sont donnés par le tableau suivant :

$$\begin{aligned}
&[H_i,H_k] = 0 && c^\tau_{ik} = 0 \\
&[H_i,E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha && c^\tau_{i\alpha} = \alpha_i \delta^\tau_\alpha \qquad \alpha = \lambda^i \alpha_i \\
&[E_\alpha,E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta} && c^{\alpha+\beta}_{\alpha\beta} = N_{\alpha\beta} \\
&[E_\alpha,E_{-\alpha}] = c^i_{\alpha-\alpha} H_i = \alpha^i H_i && c^\tau_{\alpha\beta} = 0 \quad \text{si} \quad \tau \neq \alpha+\beta \qquad .
\end{aligned} \tag{2}$$

Les quantités α_i peuvent être considérées comme les composantes, dans l'espace à ℓ dimensions, d'un vecteur $\vec{\alpha}$ appelé racine du groupe. La représentation graphique des vecteurs racines est appelée figure des racines.

On voit d'après le tableau des résultats (2) que $g_{\alpha\tau} = 0$ si $\tau \neq -\alpha$ et avec un choix convenable de normalisation $g_{\alpha-\alpha} = 1$. Le tenseur métrique d'un groupe semi-simple peut se mettre sous la forme caractéristique :

$$g_{\rho\sigma} = \left(\begin{array}{c|ccc} g_{ik} & 0 & & \\ \hline & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & & 1 \\ & 0 & & 0 \end{array}\right) \qquad \text{avec } |g_{ik}| \neq 0 \text{ et}$$

$$g_{ik} = \sum_{\alpha} c^{\alpha}_{i\alpha}\, c^{\alpha}_{k\alpha} = \sum_{\alpha} \alpha_i \alpha_k \quad .$$

L'opérateur de Casimir G du groupe commute avec tous les X_τ et s'écrit :

$$G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma = g^{ik} H_i H_k + \sum_{\alpha} E_\alpha E_{-\alpha} \quad . \qquad (3)$$

Cet opérateur joue un rôle important et nous verrons qu'il intervient dans la méthode de détermination des coefficients de Clebsch-Gordan que nous avons utilisée. La mise sous forme standard des relations de commutation, la détermination du tenseur métrique et l'expression de l'opérateur de Casimir du groupe SU_3 dans le cas des configurations $(d+s)^N$ sont données dans l'appendice II.

Les propriétés des racines $\vec{\alpha}$ sont explicitées dans le livre de Racah et nous dirons seulement qu'on peut en obtenir une représentation graphique une fois définie une base pour l'espace à ℓ dimensions. Tout groupe de Lie semi-simple est produit direct de groupes simples et pour les groupes simples on n'obtient que 4 catégories de schémas correspondant aux 4 catégories d'algèbres de Lie simples. Pour ces 4 types d'algèbre les expressions des racines en fonction des vecteurs de base de l'espace à ℓ dimension sont respectivement :

- A_ℓ : On définit $\ell+1$ vecteurs de base e_i dans l'espace à ℓ dimensions. Les racines sont toutes données par $e_i - e_k$ et sont au nombre de $\ell(\ell+1)$ auxquelles il faut ajouter

la racine $\rho=0$ ℓ fois dégénérée. Le nombre des racines, c'est-à-dire l'ordre du groupe r est donc

$$\ell(\ell+1) + \ell = \ell(\ell+2) .$$

- B_ℓ : A partir de ℓ vecteurs e_i on obtient $2\ell^2$ racines par les relations $\pm e_i$, $\pm e_i \pm e_k$. L'ordre du groupe est

$$2\ell^2 + \ell = \ell(2\ell+1) .$$

- C_ℓ : A partir de ℓ vecteurs e_i , $2\ell^2$ racines sont données par $\pm 2e_i$, $\pm e_i \pm e_k$. L'ordre est

$$2\ell^2 + \ell = \ell(2\ell+1) \quad \text{comme pour } B_\ell .$$

- D_ℓ : A partir de ℓ vecteurs e_i , $2\ell(\ell-1)$ racines sont données par $\pm e_i \pm e_k$ et l'ordre du groupe est

$$2\ell(\ell-1) + \ell = \ell(2\ell-1) .$$

Nous verrons que les groupes linéaires dont nous avons parlé sont des réalisations de groupes de Lie.

3°) Représentations des algèbres de Lie des groupes compacts.

Les rappels donnés ici ont pour but de définir la notion de poids d'une représentation, en particulier afin de montrer un peu plus loin comment s'introduisent les notations qui caractérisent les représentations irréductibles des groupes intervenant en spectroscopie.

Un groupe de Lie G est défini par r opérateurs infinitésimaux et leurs relations de commutations et celles-ci définissent une algèbre de Lie dont les éléments sont les vecteurs $A = a^\sigma X_\sigma$. Tout élément du groupe G lui-même est un produit de facteurs du type e^A .

D'une façon analogue, une représentation de l'algèbre est déterminée par la donnée de r matrices D_ρ qui vérifient

$$\boxed{[D_\rho D_\sigma - D_\sigma D_\rho] = c^\tau_{\rho\sigma} D_\tau}$$

et qu'on peut mettre sous la même forme standard que les opérateurs infinitésimaux. Il lui correspond une représentation du groupe G.

On appelle ici H_i et E_α les matrices correspondant aux opérateurs H_i et E_α précédents. Puisque les matrices H_i commutent on peut choisir les vecteurs de base d'une représentation vecteurs propres de tous les H_i simultanément.

$$H_i \psi = m_i \psi \qquad (i = 1 \ldots \ell)$$

$m = (m_1 \ldots m_\ell)$ peut être représenté par un vecteur $\vec{m}$ dans l'espace à ℓ dimensions que nous appellerons maintenant espace des poids, et $\vec{m}$ sera le poids de ψ.

L'ensemble des définitions et des propriétés donné ci-dessous relatif aux représentations des algèbres des groupes semi-simples, montre qu'une représentation irréductible peut être caractérisée par son "poids le plus haut".

Considérons l'espace des poids. On appelle S le groupe des symétries de Weyl ou groupe des symétries par rapport aux hyperplans passant par l'origine et perpendiculaire aux racines.

- On appelle poids simple un poids correspondant à un seul vecteur propre ψ.
- Les poids obtenus à partir d'un poids donné dans les opérations de S sont dits équivalents et ont même multiplicité.

- Un poids $\vec{m}$ est positif si sa première composante m_i non nulle est positive.
- Un poids $\vec{m}$ est dit plus haut que $\vec{m'}$ si $\vec{m} - \vec{m'} > 0$.
- Un poids $\vec{m}$ est dit dominant s'il est plus haut que ses équivalents.
- Le poids le plus haut est le poids dominant qui est le plus haut de tous dans la représentation.
- Si une représentation est irréductible son poids le plus haut est simple.
- Deux représentations irréductibles sont équivalentes si leurs poids les plus hauts sont égaux.
- Pour toute algèbre simple de rang ℓ il existe ℓ poids dominants fondamentaux $L^1 \ldots L^\ell$ tels que tout poids dominant s'écrit

$$\boxed{L = \sum_{i=1}^{\ell} x_i L^i} \quad \text{avec } x_i \geqslant 0 \text{ entiers.}$$

- Il existe ℓ représentations irréductibles fondamentales qui ont comme plus haut poids les poids fondamentaux.
- Enfin il existe pour tout poids dominant une représentation irréductible qui a ce poids comme plus haut poids.

Les poids fondamentaux des 4 classes d'algèbre sont, en rappelant que $L_i \geqslant L_{i+1}$:

- A_ℓ : On montre que $m_i - m_k$ est entier et $\Sigma m_i = 0$. Donc $m_i = \frac{p \text{ entier}}{\ell + 1}$. Les ℓ poids fondamentaux sont :

$$\begin{array}{ll} L^{(1)} & \frac{\ell}{\ell+1}\ ,\ \frac{-1}{\ell+1}\ ,\ \dots\ \frac{-1}{\ell+1} \\ L^{(2)} & \frac{\ell-1}{\ell+1}\ ,\ \dots\dots\dots\ \frac{-2}{\ell+1} \\ \vdots & \\ L^{(\ell)} & \frac{1}{\ell+1}\ ,\ \dots\ \frac{1}{\ell+1}\ ,\ \frac{-\ell}{\ell+1} \end{array}$$

Cas particulier :

A_2

$L^{(1)}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
$L^{(2)}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$

Ex : $(\frac{5}{3}\ \frac{2}{3}\ -\frac{7}{3}) = 1L^{(1)} + 3L^{(2)}$

et pour un poids dominant quelconque on a $x_i = L_i - L_{i+1}$.

- B_ℓ : Les m_i sont tous entiers ou tous $\frac{1}{2}$ entiers

$$\begin{array}{ll} L^{(1)} & \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \dots\ \frac{1}{2} \\ L^{(2)} & 1\ 0\ \dots\ 0 \\ \vdots & \\ L^{(\ell)} & 1\ \dots\ 1\ 0 \end{array} \qquad \begin{array}{l} x_1 = 2L_\ell \\ x_i = L_{i-1} - L_i \end{array}$$

B_3

$L^{(1)}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$L^{(2)}$	1	0	0
$L^{(3)}$	1	1	0

Ex : $(211) = 2L^{(1)} + 1L^{(2)} + 0L^{(3)}$

- C_ℓ : m_i entier

$$\begin{array}{ll} L^{(1)} & 1\ 0\ \dots\ 0 \\ \vdots & 1\ 1\ \dots\ 0 \\ L^{(\ell)} & 1\ \dots\dots\ 1 \end{array} \qquad \begin{array}{l} x_i = L_i - L_{i+1} \\ x_\ell = L_\ell \end{array}$$

C_3

$L^{(1)}$	1	0	0
$L^{(2)}$	1	1	0
$L^{(3)}$	1	1	1

Ex : $(221) = 0L^{(1)} + 1L^{(2)} + 1L^{(3)}$

- D_ℓ : m_i tous entiers ou tous $\frac{1}{2}$ entiers

$$\begin{array}{ll} L^{(1)} & \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \dots\ \frac{1}{2} \\ L^{(2)} & \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \dots\ -\frac{1}{2} \\ L^{(3)} & 1\ 0\ \dots\ 0 \\ \vdots & \\ L^{(\ell)} & 1\ 1\ \dots\ 1\ 0\ 0 \end{array} \qquad \begin{array}{l} x_1 = L_{\ell-1} + L_\ell \\ x_2 = L_{\ell-1} - L_\ell \\ x_i = L_{i-2} - L_{i-1} \end{array}$$

D_3

$L^{(1)}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$L^{(2)}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$L^{(3)}$	1	0	0

Ex : $(321) = 1L^{(1)} + 3L^{(2)} + 1L^{(3)}$

4°) Le groupe $GL_{\ell+1}$ et ses sous-groupes principaux, réalisations de groupes de Lie.

On a vu que l'ensemble des transformations linéaires $x^k = \Sigma a_i^k x^i$ forme le groupe linéaire complet $GL(\ell+1)$. Toute transformation peut s'écrire $S_a = 1 + \sum_{i,k} \partial a_i^k x^i \frac{\partial}{\partial x^k}$ et les opérateurs $X_{ik} = x^i \frac{\partial}{\partial x^k}$ peuvent être considérés comme des opérateurs infinitésimaux. Leurs relations de commutation s'écrivent $[X_{ik}, X_{mn}] = \delta_{km} X_{in} - \delta_{in} X_{mk}$ (4). On ne change pas les relations (4) si on se limite au groupe $U(\ell+1)$ des transformations unitaires. Ce groupe n'est pas semi-simple puisque $\sum_j X_{jj}$ commute avec tous les autres et génère un groupe abélien invariant. Mais si on remplace les opérateurs X_{ii} par $X'_{ii} = X_{ii} - \frac{1}{\ell+1} \sum_j X_{jj}$ les relations (4) ne sont pas changées et le groupe généré est le groupe unitaire spécial $SU_{\ell+1}$. Alors si on fait l'identification $X'_i \equiv H_i$ et $X_{ik} \equiv E_{(e_i - e_k)}$ on trouve que les opérateurs correspondent au diagramme de l'algèbre A_ℓ, et il n'y a bien que ℓ opérateurs H_i indépendants car $\sum_i H_i = 0$. Donc le groupe $SU_{\ell+1}$ est une réalisation d'un groupe de Lie semi-simple dont les opérateurs infinitésimaux définissent une algèbre A_ℓ.

a) Représentation de $U_{\ell+1}$ et $SU_{\ell+1}$.

Une base pour une représentation irréductible de $GL_{\ell+1}$ ou $U_{\ell+1}$ est également base d'une R. I. de $SU_{\ell+1}$ et si $\vec{\lambda}$ et $\vec{m}$ sont les poids respectifs de ces 2 représentations on a la relation $m_i = \lambda_i - \frac{1}{\ell+1} \sum_j \lambda_j$. Or on a vu que pour $SL_{\ell+1}$, et donc pour $SU_{\ell+1}$,

les représentations $[\lambda_1 \ldots \lambda_{\ell+1}]$ et $[\lambda_1+p \ldots \lambda_{\ell+1}+p]$ sont équivalentes. La somme $\sum_j \lambda_j$ peut être choisie quelconque en respectant toutefois λ_i entier.

Le poids le plus haut de toute représentation de $SU_{\ell+1}$ peut donc être écrit $[\mu_1 \ldots \mu_{\ell+1}]$ avec $\mu_i \geqslant \mu_{i+1}$ $\forall$ i $\mu_{\ell+1}=0$ et μ_i entier.

Ainsi, par exemple, pour $SU_3 \equiv A_2$, les poids fondamentaux

$$\begin{vmatrix} L^{(1)} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ L^{(2)} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \end{vmatrix}$$ correspondent aux représentations fondamentales

$[\frac{2}{3} -\frac{1}{3} -\frac{1}{3}]$ et $[\frac{1}{3} \frac{1}{3} -\frac{2}{3}]$, c'est-à-dire, en prenant respectivement $\Sigma \lambda_i = \frac{1}{3}$ et $\Sigma \lambda_i = \frac{2}{3}$, correspondent aux représentations [100] et [110] de SU_3.

On retrouve bien qu'une représentation de $SU_{\ell+1}$ peut être caractérisée à l'aide d'un diagramme d'Young contenant $\mu = \sum_j \mu_j$ cases réparties en ℓ rangées de μ_j cases et on sait qu'un tenseur de rang r dans l'espace à $\ell+1$ dimension et de symétrie définie par la partition $(r_1 \ldots r_{\ell+1})$ avec $\sum_{i=1}^{\ell+1} r_{\ell+1} = r$ est une base de la représentation dont le poids le plus haut L admet comme composantes $L_i = r_i - \frac{r}{\ell+1}$.

b) Groupe orthogonal en $2\ell+1$ dimensions $O_{2\ell+1}$.

Le groupe orthogonal en $2\ell+1$ dimensions $O_{2\ell+1}$ admet pour invariant la forme quadratique $\sum_{k=-\ell}^{k=+\ell} x^k x^{-k}$ et on peut choisir comme opérateurs infinitésimaux

$$X_{ik} = -X_{ki} = x^i \frac{\partial}{\partial x^{-k}} - x^k \frac{\partial}{\partial x^{-i}} \qquad (i,k = 0 \pm 1 \ldots \pm \ell)$$ avec les relations

de commutation $[X_{ik},X_{mn}] = \delta_{0,k+m} X_{in} - \delta_{0,k+n} X_{im} - \delta_{0,i+m} X_{kn} + \delta_{0,i+n} X_{km}$.

Alors, si on fait l'identification $X_{i-i} \equiv H_i$, $X_{\pm i \pm k} \equiv E(\pm e_i \pm e_k)$, $X_{0 \pm k} \equiv E_{\pm e_k}$ $(i,k > 0)$ on trouve que les opérateurs correspondent au diagramme de l'algèbre B_ℓ .

Donc le groupe orthogonal $O_{2\ell+1}$ est une réalisation d'un groupe de Lie semi-simple dont les opérateurs infinitésimaux définissent une algèbre B_ℓ . Les représentations de $O_{2\ell+1}$ ou $SO_{2\ell+1}$ peuvent donc être caractérisées par le poids le plus haut des représentations de l'algèbre B_ℓ . Ainsi, dans l'exemple traité, B_3 , le poids $[211]$ caractérise une représentation de O_7 ou SO_7 . Nous utiliserons la notation "R_3" dans le cas $SO(3)$.

c) Groupe symplectique en 2ℓ dimensions $Sp_{2\ell}$.

Le groupe symplectique en 2ℓ dimensions $Sp_{2\ell}$ admet pour invariant la forme bilinéaire antisymétrique $\sum_{k=1}^{\ell} (x^k y^{-k} - x^{-k} y^k)$. On peut choisir les opérateurs infinitésimaux $X_{ik} = X_{ki} = (-1)^{i+1} x^i \frac{\partial}{\partial x^{-k}} + (-1)^{k+1} x^k \frac{\partial}{\partial x^{-i}}$ avec les relations de commutation

$$[X_{ik},X_{m\,n}] = (-1)^{m+1} \delta_{0,k+m} X_{in} + (-1)^{n+1} \delta_{0,k+n} X_{im} + (-1)^{m+1} \delta_{0,i+m} X_{kn} + (-1)^{n+1} \delta_{0,i+n} X_{km}$$

Alors, si on fait la correspondance $X_{ii} \equiv H_i$ et $X_{\pm i \pm k} \equiv E_{(\pm e_i \pm e_k)}$ les opérateurs correspondent au diagramme de l'algèbre C_ℓ .

Donc, le groupe symplectique $Sp_{2\ell}$ est une réalisation d'un groupe de Lie semi-simple, dont les opérateurs infinitésimaux définissent une algèbre C_ℓ . Les représentations de $Sp_{2\ell}$ peuvent donc être

caractérisées par le poids le plus haut des représentations de C_ℓ . Dans l'exemple C_3 donné le poids [221] caractérise une représentation de Sp_6 .

d) Groupe orthogonal en 2ℓ dimensions $O_{2\ell}$ ou $SO_{2\ell}$.

Le groupe $O_{2\ell}$ laisse invariant $\sum_{k=1}^{\ell} x^k x^{-k}$. Les opérateurs infinitésimaux sont les mêmes que $O_{2\ell+1}$ en faisant $i,k \neq 0$. Si on utilise les mêmes identifications H_i et E_j que pour $O_{2\ell+1}$ on trouve que les opérateurs définissent l'algèbre D_ℓ . Le poids [321] de l'exemple D_3 traité peut donc caractériser une représentation de SO(6) .

5°) Produit de Kronecker de deux représentations.

On sait que si on considère n vecteurs x_i base d'une représentation irréductible $D^{(\alpha)}$ d'un groupe G et m vecteurs y_j base d'une représentation $D^{(\beta)}$ du même groupe G et si on considère les mn éléments $x_i y_j$ du produit tensoriel des 2 espaces de représentations, ils sont transformés les uns dans les autres par les opérations du groupe G et forment donc une base pour une représentation D^K de G . Cette représentation est appelée produit de Kronecker des 2 représentations et en général elle est réductible

$$D^K = D^{(\alpha)} \quad D^{(\beta)} = \sum_\tau c_\tau D^\tau \quad .$$

La réduction d'un produit de Kronecker est un problème qui intervient continuellement en physique comme nous le verrons dans la suite de cet exposé.

Si G est un groupe de Lie on a par définition

$$H_i\, x_k = m_i^k\, x_k$$

$$H_i\, y_\ell = m_i^\ell\, y_\ell$$

H est un opérateur différentiel $H_i(x_k\, y_\ell) = x_k\,(H_i y_\ell) + (H_i x_k)\; y_\ell$.

Donc $H_i(x_k\, y_\ell) = (m_i^k + m_i^\ell)\; x_k\, y_\ell$.

Les différents poids de la représentation produit consistent dans toutes les sommes des différents poids des 2 représentations initiales. Le problème de la réduction de la représentation produit est donc de déterminer les représentations irréductibles caractérisées par leur poids le plus haut "m" qui apparaissent dans la réduction du produit de Kronecker $D^\alpha\, D^\beta$ soit symboliquement $(m^\alpha)(m^\beta) = \sum_\tau c(m_\alpha, m_\beta, m_\tau)(m^\tau)$. On démontre pour le groupe $SU_{\ell+1}$ que les représentations irréductibles qui apparaissent dans la réduction $[\lambda_1 \ldots \lambda_\ell\, 0]\;\; [\mu_1 \ldots \mu_\ell\, 0]$ sont données à l'aide des tableaux d'Young associés, par les mêmes règles que la réduction du produit extérieur des deux fonctions de Schur $\{\lambda\}.\{\mu\}$ correspondantes, règles rappelées dans l'appendice (1).

6°) Théorème de Wigner-Eckart général (ou en abrégé théorème de W.E.)

Le théorème de Wigner-Eckart a une importance fondamentale dans l'application de la théorie des groupes à la mécanique quantique et nécessite la détermination des produits de Kronecker des R.I. de la chaîne de groupes pour lesquels les fonctions d'onde et les opérateurs ont des propriétés de transformation bien déterminées.

L'énoncé général est le suivant :

Si les p fonctions $\langle\gamma_1\Gamma_1\rho_1|$ forment la base d'une R.I. Γ_1 de G

" " q opérateurs $O(\gamma_2\Gamma_2\rho_2)$ " " Γ_2 de G

" " r fonctions $|\gamma_3\Gamma_3\rho_3\rangle$ " " Γ_3 de G

où les γ_i servent à distinguer les cas où la représentation Γ_i apparaît plus d'une fois dans la caractérisation des fonctions et des opérateurs, alors l'élément de matrice s'écrit comme une somme de produits de 2 facteurs

$$\langle\gamma_1\Gamma_1\rho_1|O(\gamma_2\Gamma_2\rho_2)|\gamma_3\Gamma_3\rho_3\rangle = \sum_\beta A_\beta \langle(\Gamma_2\Gamma_3)\beta\ \Gamma_1\rho_1|\Gamma_2\rho_2;\ \Gamma_3\rho_3\rangle$$

où A_β est indépendant de ρ_1,ρ_2,ρ_3 , où le deuxième facteur est un coefficient de couplage et où β distingue les représentations irréductibles équivalentes Γ_1 qui apparaissent dans la réduction du produit de Kronecker $\Gamma_2\times\Gamma_3 = \sum_i c(\Gamma_2\Gamma_3\Gamma_i)\Gamma_i$.

Si $c(\Gamma_2\Gamma_3\Gamma_1) = 0$ alors l'élément de matrice est nul.

On voit l'importance de connaître la réduction $\Gamma_Q\times\Gamma_R$ et de savoir calculer les coefficients $\langle(\Gamma_2\Gamma_3)\beta\ \Gamma_1\rho_1|\Gamma_2\rho_2;\ \Gamma_3\rho_3\rangle$ appelés coefficients de Clebsch-Gordan. Ces coefficients sont ceux des transformations linéaires qui permettent de construire une base pour les représentations irréductibles de G qui apparaissent dans la réduction du produit de Kronecker de 2 R.I. de G à partir des bases des 2 R.I. produits, comme nous le verrons plus loin. On voit aussi qu'il est essentiel de savoir construire des opérateurs possédant des propriétés de transformation bien déterminées par rapport aux groupes classant les états.

IV. Propriétés de symétrie - Pléthysmes.

La notion de pléthysme nous est nécessaire dans ce travail pour déterminer les opérateurs symétriques à p particules que l'on peut construire à partir des opérateurs monoélectroniques qui interviennent dans le problème traité. Il n'est pas possible de faire ici tous les rappels sur le groupe symétrique S_n des permutations de n objets et sur les fonctions de Schur appelées fonctions S , nécessaires à l'introduction de la notion de pléthysme. Certains rappels, la définition et les propriétés des fonctions S et l'utilisation pratique des règles de calcul des pléthysmes sont donnés dans l'appendice (1).

Nous dirons seulement que les fonctions S notées $\{\lambda\}$ sont des fonctions symétriques qu'on peut représenter par des partitions, donc par des tableaux d'Young, et qui interviennent non seulement dans l'expression des caractères du groupe fini S_n mais encore qui caractérisent les représentations irréductibles des groupes continus GL(n) ou U(n) , propriétés qui traduisent les liens dont nous avons parlé entre le groupe linéaire U_n et le groupe symétrique. Ainsi la réduction des produits de Kronecker de 2 représentations de U(n) est équivalente à la réduction du produit extérieur des 2 fonctions S associées. Une opération sur les fonctions S , introduite par Littlewood (1936), appelée pléthysme, joue un rôle déterminant dans l'étude des produits de Kronecker de k représentations de GL(n) et permet d'extraire de ces produits des représentations possédant des propriétés de symétrie de permutations bien déterminées. Ces propriétés sont importantes

puisque seuls les opérateurs symétriques par rapport à tout échange de deux électrons ont des éléments de matrice non nuls entre les états antisymétriques des configurations. La notion de pléthysme n'est pas nouvelle mais c'est seulement récemment que, grâce à B. G. Wybourne, Smith et Butler, les propriétés de symétrie et notamment les pléthysmes ont été utilisés intensément en spectroscopie atomique (1968, 1970).

Décrivons comment Wybourne donne un aperçu sur cette opération qui nous a été nécessaire pour déterminer les opérateurs symétriques à 3 particules de $(d+s)^n$. Ceux-ci sont contenus en effet dans le pléthysme $[(11)+(22)]\otimes\{3\}$ où (11) et (22) sont des représentations de SU_3 , pléthysme dont le calcul détaillé, donné dans l'appendice (1), montre un exemple d'utilisation pratique et conduit à des résultats ne figurant pas tous dans la littérature.

"Si des fonctions φ_α^Γ se transforment comme la $\alpha^{\text{ième}}$ ligne d'une représentation irréductible Γ de dimension n d'un groupe G sous-groupe de GL(n) elles peuvent être utilisées pour former une base $\varphi_\rho^{\{1\}}$ pour la représentation $\{1\}$ de GL(n) .
D'autre part les produits de fonctions de degré r $[\varphi_\rho^{\{1\}}]^r$ peuvent former des bases pour les représentations $\{\lambda\}$ de GL(n) contenues dans le produit de Kronecker de r représentations $\{1\}$ de GL(n) : $\{1\}^r = \Sigma\, g_\lambda \{\lambda\}$ (1) où λ est une partition de r et g_λ le nombre de fois que $\{\lambda\}$ apparaît dans la décomposition. Les produits de fonctions construits à partir des $\varphi_\rho^{\{1\}}$ et formant une base pour la représentation $\{\lambda\}$ de GL(n) ont la symétrie de permutation associée

avec la représentation correspondante $[\lambda]$ du groupe symétrique S_r et g_λ est la dimension de $[\lambda]$. Les représentations $\{\lambda\}$ de $GL(n)$ sont généralement réductibles dans la réduction au sous-groupe G . En pratique on est intéressé par les produits de fonctions d'un type de symétrie $[\lambda]$ particulier et donc par savoir extraire ceux-ci parmi tous ceux de la somme (1). Plus précisément, supposons que Γ corresponde à une R.I. $\{\mu\}$ de $GL(m)$ et que les fonctions $\varphi_\alpha^{\{\mu\}}$ forment une base pour cette représentation. Si la dimension de $\{\mu\}$ est n $(m < n)$ les fonctions $\varphi_\alpha^{\{\mu\}}$ forment aussi une base pour la représentation $\{1\}$ de $GL(n)$. On construit les produits des $\varphi_\alpha^{\{\mu\}}$ de degré r et on en extrait une base par la représentation $\{\nu\}$ de $GL(n)$ où $\{\nu\}$ est une partition de r . En général ces produits de fonctions forment une base pour une représentation réductible de $GL(m)$. Si on appelle $\varphi^{\{\lambda\}}$ les fonctions formant une base pour les représentations irréductibles de $GL(m)$ et les produits de fonctions $\varphi^{(\mu)}$ formant une base pour la représentation $\{\nu\}$ de $GL(n)$ par $|\varphi^{\{\mu\}}|^{\{\nu\}}$ on a alors :

$$|\varphi^{\{\mu\}}|^{\{\nu\}} = \Sigma\, \varphi^{\{\lambda\}} \quad . \tag{2}$$

On montre qu'en termes d'invariants matriciels (définis dans l'appendice 1) l'équation (2) s'écrit :

$$|A^{\{\mu\}}|^{\{\nu\}} = \Sigma\, A^{\{\lambda\}} \quad . \tag{3}$$

Or les fonctions $S\ \{\lambda\}$ sont définies comme la trace de l'invariant matriciel $A^{\{\lambda\}}$ donc l'équation (3) définit un type particulier d'opérations sur les fonctions S appelé pléthysme et noté $\otimes$.

Prenant la trace des matrices on a l'équation

$\{\mu\}\otimes\{\nu\} = \Sigma\ \{\lambda\}$ où $\{\nu\}$ est une partition de r

qu'on peut interpréter ainsi : partant d'une série de fonctions de type de symétrie $\{\mu\}$ on forme des produits symétrisés de degré r et de type de symétrie $\{\nu\}$. A partir de ces produits on sélectionne les fonctions de type $\{\lambda\}$ apparaissant dans le produit $\{\mu\}^r$ ".

Considérons par exemple le carré Kronecker

$$\{\mu\}\times\{\mu\} = \sum_{\lambda}\ \{\lambda\} \quad .$$

On a donc $r=2$ et les seules partitions possibles de 2 étant $[2]$ et $[1^2]$ on a $\{\nu\} = \{2\}$ ou $\{1^2\}$.

Le pléthysme $\{\mu\}\otimes\{2\}$ sélectionne les $\{\lambda\}$ de type de symétrie $[2]$ donc symétriques.

Le pléthysme $\{\mu\}\otimes\{1^2\}$ sélectionne les $\{\lambda\}$ de type de symétrie $[1^2]$ donc antisymétriques.

On a simplement dans ce cas $\{\mu\}\times\{\mu\} = \{\mu\}\otimes\{2\} + \{\mu\}\otimes\{1^2\}$.

Donc si l'on sait déterminer les pléthysmes $\otimes\{2\}$ et $\otimes\{1^2\}$ on sait décomposer un carré Kronecker en représentations symétriques et antisymétriques.

D'une façon générale le pléthysme $\otimes\{r\}$ sert à construire des ensembles de r produits complètement symétriques et le pléthysme $\otimes\{1^r\}$ à construire des ensembles complètement antisymétriques.

Les règles d'évaluations des pléthysmes ont été données par Littlewood et explicitées par Wybourne et Butler (1970). Elles sont rappelées dans l'appendice (1).

On a vu que les fonctions S servent à caractériser les représentations

de $GL(n)$ et $U(n)$; les caractères de ces représentations sont des fonctions S qui sont alors des fonctions des racines des matrices de la représentation. On peut donc utiliser la même notation pour la représentation de $GL(n)$ ou $U(n)$ et la fonction S associée. De même Littlewood a montré que les caractères des représentations des sous-groupes de $U(n)$ soit $SO(2\nu)$, $SO(2\nu+1)$, $Sp(2\nu)$ peuvent aussi s'exprimer sous la forme de fonctions S et le concept de pléthysme s'étend à ces différents groupes. L'opération de pléthysme peut alors être utilisée pour trouver les réductions des représentations d'un groupe G en représentations d'un sous-groupe $H \subset G$.

V. Application de la théorie des groupes à la spectroscopie atomique.

Ces rappels essaient de montrer comment les notions théoriques définies au début de ce chapitre s'introduisent en spectroscopie atomique mais sont destinés surtout à présenter les classifications des configurations d^N et $(d+s)^N$ qui sont utilisées dans les travaux exposés, ainsi que les classifications et les propriétés d'hermiticité des opérateurs tensoriels monoélectroniques agissant dans ces configurations ; nous donnons ensuite le principe de la classification des opérateurs multiélectroniques qui nous sont nécessaires dans notre étude. Puis, après avois rappelé la définition des coefficients de Clebsch-Gordan (ou C.C.G.) et la forme générale du théorème de Wigner-Eckart (ou W.E.) pour une chaîne de réductions, nous montrons comment les C.C.G. sont nécessaires à la classification explicite des opérateurs à plusieurs particules, classification permettant alors d'utiliser le théorème de W.E. pour calculer leurs éléments de matrice. Enfin nous présentons le principe de la méthode utilisée pour déterminer les C.C.G. des groupes de Lie compacts semi-simples.

L'introduction de la théorie des groupes par Racah dans l'étude des configurations atomiques ℓ^n repose sur deux idées fondamentales :

- Utiliser les propriétés d'antisymétrie des fonctions d'onde atomiques par rapport à tout échange de deux électrons. Ces propriétés de symétrie permettent de montrer que les $C_n^{4\ell+2}$ états d'une configuration ℓ^n se transforment comme la représentation antisymétrique $\{1^n\}$ du groupe linéaire $U_{4\ell+2}$.

- Utiliser la symétrie d'invariance par rapport aux groupes de rotation dans les espaces de spin et d'orbite $SU_2 \times R_3$. On est donc intéressé par des vecteurs de base qui forment une base pour la représentation $\{1^n\}$ de $U_{4\ell+2}$ et pour les représentations $\mathcal{D}_S$ et $\mathcal{D}_L$ de SU_2 et R_3 , et par des opérateurs représentant les interactions physiques et agissant entre ces états. Si des groupes d'opérations linéaires G sous-groupes de $U_{4\ell+2}$ incluant les opérations de R_3 peuvent être trouvés, on peut utiliser les représentations de ces groupes pour caractériser plus complètement les vecteurs de base. En général pour un problème donné plusieurs chaînes de réductions sont possibles.

1°) Les opérateurs tensoriels.

Le théorème de Wigner-Eckart nécessite l'utilisation d'opérateurs possédant des propriétés de transformation bien définies ; l'application du théorème à un groupe R_3 a conduit Racah à introduire la notion d'opérateur tensoriel :

Les $(2k+1)$ opérateurs T^k_q forment les composantes d'un opérateur tensoriel T^k de rang k s'ils vérifient, avec les opérateurs infinitésimaux de R_3 exprimés sous forme standard, les relations suivantes :

$$[J_z, T^k_q] = q\, T^k_q \quad ; \quad [J_\pm, T^k_q] = \{k(k+1)-q(q\pm1)\}^{\frac{1}{2}}\, T^k_{q\pm1} \quad .$$

Alors le théorème de Wigner-Eckart prend dans le cas de R_3 la forme simple :

$$\langle \gamma K M_K | T^k_q | \gamma' K' M'_K \rangle = A(K M_K | kq ; K' M'_K) = (-1)^{K-M_K} \begin{pmatrix} K & k & K' \\ -M_K & q & M'_K \end{pmatrix} \langle \gamma K || T^k || \gamma' K' \rangle .$$

La notion d'opérateur tensoriel se généralise et on peut définir des opérateurs tensoriels doubles agissant dans les espaces de spin et d'orbite.

Les $(2\varkappa+1)(2k+1)$ opérateurs $T^{\varkappa k}_{\pi q}$ forment les composantes d'un opérateur tensoriel double de rang $\varkappa$ dans l'espace de spin et k dans l'espace d'orbite s'ils vérifient :

$$[Lz, T^{\varkappa k}_{\pi q}] = q\, T^{\varkappa k}_{\pi q} \quad ; \quad [L\pm, T^{\varkappa k}_{\pi q}] = \{k(k+1)-q(q\pm1)\}^{\frac{1}{2}}\, T^{\varkappa k}_{\pi, q\pm1}$$

$$[Sz, T^{\varkappa k}_{\pi q}] = \pi\, T^{\varkappa k}_{\pi q} \quad ; \quad [S\pm, T^{\varkappa k}_{\pi q}] = \{\varkappa(\varkappa+1)-\pi(\pi\pm1)\}^{\frac{1}{2}}\, T^{\varkappa k}_{\pi\pm1, q} .$$

Le théorème de W.E. s'écrit alors :

$$\langle \gamma S M_S L M_L | T^{\varkappa k}_{\pi q} | \gamma' S' M'_S L' M'_L \rangle = (-1)^{S+L-M_S-M_L} \begin{pmatrix} S & \varkappa & S' \\ -M_S & \pi & M'_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & k & L' \\ -M_L & q & M'_L \end{pmatrix} \langle \gamma S L || T^{\varkappa k} || \gamma' S' L' \rangle .$$

On voit d'après la définition qu'un opérateur tensoriel simple ou double est complètement défini par la donnée de ses éléments de matrice réduits.

2°) Classification des états des configurations ℓ^n - Cas particulier de d^n .

Pour étudier ℓ^n on a besoin de définir des opérateurs tensoriels réalisant l'ensemble des transformations linéaires des $C_n^{4\ell+2}$ états

de ℓ^n . Ces opérateurs sont les seuls nécessaires pour tenir compte de toute interaction physique au premier ordre de perturbation ainsi qu'au second ordre grâce à l'introduction des opérateurs effectifs. Les opérateurs multiélectroniques symétriques $W^{\varkappa k}_{\pi q} = \sum_i w_i \, {}^{\varkappa k}_{\pi q}$ sont des doubles tenseurs complètement définis par la donnée des éléments de matrice réduits entre deux fonctions monoélectroniques

$$\langle s\ell \| w^{\varkappa k} \| s'\ell' \rangle = \delta(ss')\delta(\ell\ell')([\varkappa][k])^{\frac{1}{2}} \quad .$$

L'action des $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ sur un état $|s\ell m_s m_\ell\rangle$ montre que les commutateurs vérifient :

$$\left[{}^{\varkappa_1 k_1}_{\pi_1 q_1} w \, , \, {}^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2} w \right] = \sum_{\substack{\varkappa_3 \pi_3 \\ k_3 q_3}} (-1)^{2s+2\ell-\pi_3-q_3} \left[(-1)^{\varkappa_1+\varkappa_2+\varkappa_3+k_1+k_2+k_3} - 1 \right]$$

$$\begin{Bmatrix} \varkappa_1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ s & s & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell & \ell & \ell \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} \varkappa_1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix}$$

$$(1) \qquad ([\varkappa_1][\varkappa_2][\varkappa_3][k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \, {}^{\varkappa_3 k_3}_{\pi_3 q_3} w \quad ,$$

équation du type $[X_\rho, X_\sigma] = c^\tau_{\rho\sigma} X_\tau$, qui reste valable si on remplace les $w^{\varkappa k}$ par les $W^{\varkappa k}$ et qui montre que ces opérateurs peuvent être regardés comme les opérateurs infinitésimaux d'un groupe de Lie.

Les $(4\ell+2)^2$ matrices de dimension $(4\ell+2)$ dont les éléments sont définis par

$$\langle s\ell m_s m_\ell | w^{\varkappa k}_{\pi q} | s\ell m'_s m'_\ell \rangle = (-1)^{s+\ell-m'_s-m'_\ell} ([\varkappa][k])^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} s & \varkappa & s \\ -m_s & \pi & m'_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell \\ -m_\ell & q & m'_\ell \end{pmatrix}$$

sont linéairement indépendantes et forment un ensemble linéaire complet. Donc les opérateurs $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ peuvent bien être considérés comme les opérateurs infinitésimaux du groupe linéaire complet ou de son

sous-groupe unitaire $U_{4\ell+2}$ qu'on peut réduire à $SU_{4\ell+2}$ en enlevant w_{00}^{00} qui commute avec tous les autres $w_{\pi q}^{\mu k}$.

L'étude des $c_{\rho\sigma}^{\tau}$, c'est-à-dire l'étude des relations de commutation (1) montre qu'on peut réduire $SU_{4\ell+2}$:

Ainsi, les opérateurs w_{0q}^{0k} forment un sous-groupe invariant $SU_{2\ell+1}$

les opérateurs $w_{\pi 0}^{10}$ " " " SU_2

$SU_{4\ell+2}$ se réduit au produit direct $SU_2 \times SU_{2\ell+1}$, réduction qui assure l'indépendance des transformations dans les espaces de spin et d'orbite.

Si k_1 et k_2 sont impairs, seuls les opérateurs avec k_3 impair apparaissent dans l'équation (1) ; ils forment un sous-groupe et on montre qu'il s'agit de $SO_{2\ell+1}$ lui-même réductible à R_3 . On peut donc utiliser la chaîne de réductions :

$$SU_{4\ell+2} \supset SU_2 \times [SU_{2\ell+1} \supset SO_{2\ell+1} \supset R_3] \qquad (2)$$

Ce n'est pas la seule réduction possible de $SU_{4\ell+2}$. Les opérateurs $w_{\pi q}^{\mu k}$ avec $\mu+k$ impair forment aussi un sous-groupe. Ils laissent l'état ^1S de ℓ^2 invariant, c'est-à-dire qu'ils laissent une forme bilinéaire symétrique invariante. Il s'agit du groupe symplectique $Sp_{4\ell+2}$ lui-même réductible à $SU_2 \times SO_{2\ell+1}$. On a donc les 2 chaînes de réductions possibles :

$$SU_{4\ell+2} \begin{cases} \supset SU_2 \times SU_{2\ell+1} \\ \supset Sp_{4\ell+2} \end{cases} \supset SU_2 \times [SO_{2\ell+1} \supset R_3] \qquad (3)$$

Les $C_n^{4\ell+2}$ états $|\ell^n \gamma S L M_S M_L\rangle$ sont complètement antisymétriques et

forment une base de la représentation irréductible antisymétrique $\{1^n\}$ ou $\{\overbrace{1\ldots1}^{n}\ \overbrace{0\ldots0}^{4\ell+2}\}$ de $U_{4\ell+2}$. On montre que les représentations de $SU_{2\ell+2}$ qui apparaissent dans la réduction de $\{1^n\}$ sont du type $\{2^a 1^b\}$ avec $b=2S$ et $2a+b=n$ et la donnée de cette réduction n'apporte rien de plus que la donnée de n et S.

Les représentations $\langle\sigma\rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$ qui apparaissent dans la réduction de $\{1^n\}$ vérifient $\{\overbrace{1\ldots1}^{n}\} \to \langle\overbrace{1\ldots1}^{n}\rangle + \langle\overbrace{1\ldots1}^{n-2}\rangle + \ldots$ et les représentations $\langle\sigma_1\ldots\sigma_{2\ell+1}\rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$ utiles pour définir les états de ℓ^N peuvent être repérées par la donnée de $v = \sum_i \sigma_i$ appelée séniorité. Si on appelle U les représentations de $SO_{2\ell+1}$ les états peuvent être caractérisés par $|\ell^n\ vUSLM_S M_L\rangle$. Les réductions nécessaires s'obtiennent à l'aide des produits de Kronecker ou des produits des fonctions S associées et on a pour les configurations d^N

	U_{10}	v	$SU_2 \times SO_5$	$SU_2 \times R_3$
d^1	$\{1\}$	1	$^2(10)$	^2D
d^2	$\{1^2\}$	2	$^3(11)$	$^3F,\ ^3P$
			$^1(20)$	$^1G,\ ^1D$
		0	$^1(00)$	^1S
d^3	$\{1^3\}$	3	$^4(11)$	$^4F,\ ^4P$
			$^2(21)$	$^2P,D,F,G,H$
		1	$^2(10)$	^2D

	U_{10}	v	$SU_2 \times SO_5$	$SU_2 \times R_3$
d^4	$\{1^4\}$	4	$^5(10)$	^5D
			$^3(21)$	$^3P,D,F,G,H$
			$^1(22)$	$^1S,D,F,G,I$
		2	$^3(11)$	$^3P,F$
			$^1(20)$	$^1D,G$
		0	$^1(00)$	^1S
d^5	$\{1^5\}$	5	$^6(00)$	^6S
			$^4(20)$	$^4D,G$
			$^4(22)$	$^4S,D,F,G,I$
		3	$^4(11)$	$^4P,F$
			$^2(21)$	$^2P,D,F,G,H$
		1	$^2(10)$	^2D

Les 2 chaînes de réduction (3) ne sont pas les seules possibles mais sont les seules pour lesquelles S et L sont des bons nombres quantiques et définissent donc une base de couplage LS. C'est cette classification des états d^N que nous utilisons dans le travail exposé au Chapitre III.

3°) Classification des états des configurations $(\ell+\ell')^n$. Classification SU_3 de $(d+s)^n$.

Cette fois les opérateurs multiélectroniques nécessaires agissant sur les états $(\ell+\ell')^n$ sont ceux définis par S. Feneuille (1969)

$$w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell') = \sum_i w^{\varkappa k}_{i\,\pi q}(\ell\ell') \quad \text{avec}$$

$$\langle s\ell \| w^{\varkappa k}(\ell_a \ell_b) \| s\ell' \rangle = \delta(\ell\ell_a)\delta(\ell_b\ell') \{[\varkappa][k]\}^{\frac{1}{2}} \quad .$$

Par des raisonnements semblables à ceux utilisés précédemment, S. Feneuille a montré que les $[4(\ell+\ell'+1)]^2$ opérateurs $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell')$ peuvent être considérés comme les opérateurs infinitésimaux du groupe $U_{4(\ell+\ell'+1)}$ qui se réduit à $SU_{4(\ell+\ell'+1)}$ en enlevant l'opérateur $([\ell]+[\ell'])^{-\frac{1}{2}} ([\ell']^{\frac{1}{2}} w^{00}(\ell'\ell')+[\ell]^{\frac{1}{2}} w^{00}(\ell\ell))$. Par l'étude des commutateurs il a montré qu'on obtient les deux réductions :

$$SU_{4(\ell+\ell'+1)} \nearrow Sp_{4(\ell+\ell'+1)} \searrow SU_2 \times [SO_{2(\ell+\ell'+1)} \supset SO_{2\ell+1}(\supset R_3) \times SO_{2\ell'+1}(\supset R_3) \supset R_3]$$
$$SU_{4(\ell+\ell'+1)} \searrow SU_2 \times SU_{2(\ell+\ell'+1)} \nearrow SU_2 \times [SO_{2(\ell+\ell'+1)} \supset SO_{2\ell+1}(\supset R_3) \times SO_{2\ell'+1}(\supset R_3) \supset R_3]$$

Ici encore la représentation $\{1^n\}$ de $U_{4(\ell+\ell'+1)}$ se décompose en représentations de $Sp_{4(\ell+\ell'+1)}$ du type $\underbrace{\langle 1 \ldots 1 \rangle}_{n} + \underbrace{\langle 1 \ldots 1 \rangle}_{n-2} + \ldots$ et

on peut définir la séniorité $v = \sum_{i=1}^{2(\ell+\ell'+1)} \sigma_i$. Les états de $(d+s)^n$ sont caractérisés dans cette réduction à l'aide des nombres quantiques $|(d+s)^n\ vWUSLM_S M_L\rangle$ où W et U désignent les représentations de SO_6 et SO_5 .

Ce n'est pas la seule classification possible des opérateurs agissant dans $(d+s)^n$ conservant le couplage LS, et la chaîne de réductions utilisée dans le Chapitre II de ce travail, consacré à la détermination des opérateurs à 2 et 3 particules agissant dans $(d+s)^n$, introduit le groupe SU_3 . L'utilisation de cette réduction n'est pas standard en physique atomique et est décrite de façon détaillée dans l'Appendice II.

Dans ce schéma, étudié par Elliott (1958) et par S. Feneuille et A. Crubellier (1970), les états de $(d+s)^n$ sont décrits par leurs propriétés de transformation dans les opérations des groupes

$$\boxed{SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]}$$

Rappelons brièvement les résultats.

L'ensemble des opérateurs $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell')$ agissant à l'intérieur des configurations $(d+s)^n$ sont :

$(4\ell+2)^2$ soit 10^2 opérateurs $w^{\varkappa k}_{\pi q}(dd)$ avec $\varkappa=0,1$ et $0 \leqslant k \leqslant 4$

$(4\ell'+2)^2$ soit 2^2 " $w^{\varkappa k}_{\pi q}(ss)$ avec $\varkappa=0,1$ et $k=0$

$4(2\ell+1)(2\ell'+1)$ soit 20 " $w^{\varkappa k}_{\pi q}(ds)$ avec $\varkappa=0,1$; $k=2$

" " 20 " $w^{\varkappa k}_{\pi q}(sd)$ avec $\varkappa=0,1$; $k=2$

et forment les 12^2 opérateurs infinitésimaux de U_{12} (cf. Appendice II). L'opérateur $O = \frac{1}{\sqrt{6}} [\sqrt{5}\ w^{00}(dd) + w^{00}(ss)]$ commute avec tous les autres et en le supprimant on obtient SU_{12} réductible, comme on l'a vu, à $SU_2 \times SU_6$ dont les opérateurs infinitésimaux sont respectivement :

- pour $SU_2(d,s)$: $\frac{1}{\sqrt{6}} [\sqrt{5}\ w^{10}(dd) + w^{10}(ss)]$

- pour $SU_6^{\varepsilon\varepsilon'}(d,s)$: Tous les opérateurs de rang 0 par rapport au spin, c'est-à-dire en posant $V^k = \sqrt{2}\ w^{0k}$: $V^1(dd)$, $\varepsilon V^2(dd)$, $\varepsilon V^{3,4}(dd)$, $\varepsilon V^2(ds)$, $\varepsilon' V^2(sd)$, $\frac{1}{\sqrt{6}} [V^0(dd) - \sqrt{5}\ V^0(ss)]$. On montre alors que $V_q^1(dd)$ et $V_q^{+2}(\varepsilon\varepsilon')$ forment les opérateurs infinitésimaux du sous-groupe $SU_3^{\varepsilon\varepsilon'}(d,s)$ avec $V^{+2}(\varepsilon\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{15}} \{\varepsilon \sqrt{7}\ V^2(dd) + \varepsilon' 2[V^2(ds) + V^2(sd)]\}$.

Les ε,ε' sont égaux à ± 1 et nous prendrons $\varepsilon = \varepsilon' = 1$.

L'ensemble des états de $(d+s)^n$ sont antisymétriques et forment la base de la représentation antisymétrique $\{1^{12}\}$ de U_{12} . Le produit des n fonctions d'onde orbitales doit former un tenseur de rang n par rapport à SU_6 , de type de symétrie déterminé et donné par le diagramme d'Young correspondant. De même le produit des n fonctions de spin doit former un tenseur de rang n de SU_2 de type de symétrie donné par un autre diagramme d'Young. Enfin, on doit multiplier les fonctions d'espace et de spin afin d'obtenir une fonction d'onde totalement antisymétrique. On montre qu'il faut pour cela que les fonctions d'espace et de spin correspondent à des diagrammes d'Young associés. L'existence de deux fonctions monoélectroniques de spin limite les diagrammes de spin à 2 lignes avec $\lambda_1 + \lambda_2 = n$ et $S = \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2)$

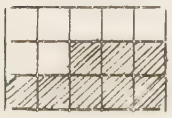
et donc limite les diagrammes d'orbite à 2 cases par ligne . De même l'existence de $2(\ell+\ell'+1) = 6$ fonctions monoélectroniques d'orbite limite les diagrammes d'orbite à $2(\ell+\ell'+1)$ soit 6 lignes. Les deux diagrammes se déduisant l'un de l'autre, un seul diagramme d'Young est donc nécessaire et définit à la fois la partition qui détermine la façon dont les fonctions orbitales se transforment dans les opérations de S_n agissant sur les coordonnées des n électrons et la représentation irréductible de $U_{2(\ell+\ell'+1)}$ dont elles forment une base.

Finalement on montre que dans la réduction $SU_{12} \supset SU_2 \times SU_6$ la représentation $\{1^{12}\}$ se décompose en $\Sigma \{2^a 1^b 0\}$ avec $b=2S$ et $2a+b=n$ et on obtient pour l'ensemble des configurations $(d+s)^n$ de n=0 à 12 les résultats suivants :

n	$\{2^a 1^b\}$	S	n	$\{2^a 1^b\}$	S	n	$\{2^a 1^b\}$	S	n	$\{2^a 1^b\}$	S
0	$\{2^0 1^0\}$	0	12	$\{2^6 1^0\}$	0	5	$\{2^2 1^1\}$	1/2	7	$\{2^3 1^1\}$	1/2
1	$\{2^0 1^1\}$	1/2	11	$\{2^5 1^1\}$	1/2		$\{2^1 1^3\}$	3/2		$\{2^2 1^3\}$	3/2
2	$\{2^1 1^0\}$	0	10	$\{2^5 1^0\}$	0		$\{2^0 1^5\}$	5/2		$\{2^1 1^5\}$	5/2
	$\{2^0 1^2\}$	1		$\{2^4 1^2\}$	1	6	$\{2^3 1^0\}$	0			
3	$\{2^1 1^1\}$	1/2	9	$\{2^4 1^1\}$	1/2		$\{2^2 1^2\}$	1			
	$\{2^0 1^3\}$	3/2		$\{2^3 1^3\}$	3/2		$\{2^1 1^4\}$	2			
4	$\{2^2 1^0\}$	0	8	$\{2^4 1^0\}$	0		$\{2^0 1^6\}$	3			
	$\{2^1 1^2\}$	1		$\{2^3 1^2\}$	1						
	$\{2^0 1^4\}$	2		$\{2^2 1^4\}$	2						

TABLEAU I

D'après ce que nous avons vu précédemment, la représentation contragrédiente d'une représentation $\{2^a 1^b\}$ de SU_6 ou $\{2^{\frac{n}{2}-S} 1^{2S}\}$ est la représentation dont le diagramme complète le rectangle à 6 lignes soit $\{2^{6-a-b}\ 1^b\}$ ou $\{2^{6-\frac{n}{2}-S}\ 1^{2S}\}$. On sait que pour un groupe SU_n c'est aussi la représentation conjuguée. On voit sur le tableau I précédent que la décomposition d'une représentation $(d+s)^{12-n}$ est l'ensemble des représentations conjuguées de la décomposition de $(d+s)^n$. Donc à l'équivalence trou-particule correspond l'opération de conjugaison.

L'équivalence pour un groupe SU_n des représentations $\{\lambda_1 \ldots \lambda_n\}$ et $\{\lambda_1+p \ldots \lambda_n+p\}$ limite les représentations de SU_3 à 2 lignes : $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\} \equiv \{\lambda_1-\lambda_3, \lambda_2-\lambda_3, 0\} = \{\lambda'_1\lambda'_2\}$. La représentation conjuguée de $\{\lambda_1\lambda_2\}$ complète le rectangle à 3 lignes et s'écrit donc $\{\lambda_1, \lambda_1-\lambda_2\}$:  . On montre (cf. Appendice II) que les représentations de SU_3 caractérisées en principe par leur poids le plus haut $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\}$ peuvent être représentées aussi par $(\sigma_1\sigma_2)$ ou $\sigma_1 = \lambda_1-\lambda_2$ et $\sigma_2 = \lambda_2-\lambda_3$ (notation d'Elliott)

$\{\lambda_1\lambda_2\ 0\}$ s'écrit donc $(\sigma_1\sigma_2)$ avec $\begin{cases}\sigma_1 = \lambda_1-\lambda_2 \\ \sigma_2 = \lambda_2\end{cases}$ et on voit qu'alors sa conjuguée

$\{\lambda_1, \lambda_1-\lambda_2, 0\}$ s'écrit $(\sigma'_1\sigma'_2)$ avec $\begin{cases}\sigma'_1 = \lambda_1-(\lambda_1-\lambda_2) = \lambda_2 = \sigma_2 \\ \sigma'_2 = \lambda_1-\lambda_2 = \sigma_1\end{cases}$ soit $(\sigma_2\sigma_1)$,

c'est-à-dire que l'on a $\underline{(\sigma_1\sigma_2)^* = (\sigma_2\sigma_1)}$

Etats $(d+s)^n$

TABLEAU II

n	SU_6	S	SU_3 $(\sigma_1\sigma_2)$
0	[0...0]	0	(00)
1	[1...0]	1/2	(20)
2	[11]	1	(21)
	[2]	0	(02),(40)
3	$[1^3]$	3/2	(03),(30)
	[21]	1/2	(11),(22),(41)
4	$[1^4]$	2	(12)
	$[21^2]$	1	(01),(12),(31),(23),(50)
	$[2^2]$	0	(20),(31),(04),(42)
5	$[1^5]$	5/2	(02)
	$[21^3]$	3/2	(10),(21),(13),(32)
	$[2^21]$	1/2	(02),(21),(13),(40),(32),(24),(51)
6	$[1^6]$	3	(00)
	$[21^4]$	2	(11),(22)
	$[2^21^2]$	1	(11),(03),(30),(22),(14),(41),(33)
	$[2^3]$	0	(00),(22),(22)',(33),(06),(60)

SU_3 $(\sigma_1\sigma_2)$ R_3

TABLEAU III

(00)S	(40)S,D,G
(10)P	(41)P,D,F,G,H
(11)P,D	(32)P,D,F,F',G,H
(20)S,D	(33)P,D,F,F',G,G',H,I
(21)P,D,F	(42)S,D,D',F,G,G',H,I
(30)P,F	(50)P,F,H
(22)S,D,D',F,G	(60)S,D,G,I
(31)P,D,F,G	

La décomposition $SU_3 \supset R_3$ est la même pour la représentation $(\sigma_2\sigma_1)$ conjuguée de $(\sigma_1\sigma_2)$.

On se limite donc à la décomposition des représentations $\{2^a 1^b\}$ de SU_6 pour $n \leqslant 6$ car, d'après ce qui précède, si $\{2^{\frac{n}{2}-S}\ 1^{2S}\} = \Sigma\, g(n,s,\sigma_1,\sigma_2)(\sigma_1\sigma_2)$, la décomposition de la représentation conjuguée $\{2^{6-\frac{n}{2}-S}\ 1^{2S}\}$ est la décomposition conjuguée de la précédente

soit $\{2^{6-\frac{n}{2}-S}\ 1^{2S}\} = \Sigma\, g(n,s,\sigma_1,s_2)(\sigma_1\sigma_2)$

On obtient finalement la classification complète des états des configurations $(d+s)^n$ dans le schéma $SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$ donnée par les tableaux II et III où les décompositions des représentations de SU_6 dans la réduction $SU_6 \supset SU_3$ peuvent être obtenues à l'aide des produits de Kronecker ou des pléthysmes ; celles de $SU_3 \supset R_3$ sont données par Elliott (1958) à l'aide de règles simples et sont aussi tabulées dans le livre de Wybourne et Butler (1970). Les états de $(d+s)^n$ sont caractérisés dans cette réduction à l'aide des nombres quantiques $|(d+s)^n\ S(\sigma_1\sigma_2)\ \alpha L M_S M_L\rangle$, où α repère les représentations L équivalentes apparaissant dans la réduction $SU_3 \supset R_3$, et où $(\sigma_1\sigma_2)$ caractérise les représentations de SU_3 en notation d'Elliott.

4°) Classification des opérateurs monoélectroniques.

a) Cas des configurations ℓ^n .

Les opérateurs nécessaires pour expliciter toute interaction réelle ou effective sont les $w^{\nu k}_{\pi q} = \Sigma_i\, w_i\, {}^{\nu k}_{\pi q}$ et l'on sait qu'ils forment les opérateurs infinitésimaux de $U_{4\ell+2}$. Pour trouver suivant quelles représentations les générateurs de U_ν se transforment, il suffit

d'écrire leurs relations de commutation avec les opérateurs $H_i \equiv X_{ii}$ et d'étudier les poids obtenus. On montre qu'ils se transforment comme $\{21^{\nu-2}\}+\{0\}$ de U_ν. Les $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ se transforment donc comme $\{21^{4\ell}\}+\{0\}$ de $U_{4\ell+2}$ ou, si on enlève w^{00}, comme $\{21^{4\ell}\}$ de $SU_{4\ell+2}$. D'autre part si on compare les résultats de

$$w^{\varkappa_1 k_1}_{\pi_1 q_1} |\ell^2 \varkappa_2 \pi_2 k_2 q_2\rangle = \Sigma \ldots [(-1)^{\varkappa} + (-1)^{\varkappa_1 + k_1}] \ldots |\ell^2 \varkappa_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle$$

et ceux de

$$[w^{\varkappa_1 k_1}_{\pi_1 q_1}, w^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2}] = \Sigma \ldots [(-1)^{\varkappa} - 1] \ldots\ldots w^{\varkappa_3 k_3}_{\pi_3 q_3}$$

on trouve la même expression pour les coefficients de $|\ell^2 \varkappa_3 \pi_3 k_3 q_3\rangle$ et $w^{\varkappa_3 k_3}_{\pi_3 q_3}$ si $\varkappa_1 + k_1$ impair. Or cette condition est satisfaite par les opérateurs infinitésimaux de $Sp_{4\ell+2}$ et $SO_{2\ell+1}$. On peut donc caractériser l'ensemble des $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ par les représentations de $Sp_{4\ell+2}$ et $SO_{2\ell+1}$ auxquelles appartiennent les états de ℓ^2 correspondant.

Les états de ℓ^2 : ${}^3P$, ${}^3F$, .. ${}^1D$, ${}^1G$ ($\varkappa_2 = S$, $k_2 = L$) vérifie (S+L) pair et forment la représentation $\langle 1^2 \rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$; donc les opérateurs $w^{\varkappa k}$ avec $(\varkappa+k)$ pair se transforment comme $\langle 1^2 \rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$. Les $w^{\varkappa k}$ avec $(\varkappa+k)$ impair correspondent aux états interdits symétriques de ℓ^2, c'est-à-dire à ceux formant une base pour la représentation symétrique $\{2\}$ de $U_{4\ell+2}$ soit $\langle 2 \rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$. Les $w^{\varkappa k}$ avec $(\varkappa+k)$ impair se transforment donc comme $\langle 2 \rangle$ de $Sp_{4\ell+2}$. De même les termes

L pair de ℓ^2 forment la base de la représentation (20) de $SO_{2\ell+1}$

L impair " " " " (1^2) de $SO_{2\ell+1}$.

Donc les w^{uk} avec k pair se transforment comme (20) de $SO_{2\ell+1}$

" w^{uk} " k impair " " (1^2) de $SO_{2\ell+1}$

et on obtient finalement la classification des opérateurs w^{uk} dans la chaîne utilisée donnée par le tableau ci-dessous où l'on a précisé en particulier le cas des configurations d^N qui nous sera utile.

w^{uk} de ℓ^n	U_{10} Sp_{10} $SU_2\times SO_5$ / $U_{4\ell+2}$ $Sp_{4\ell+2}$ $SU_2\times SO_{2\ell+1}$	$SU_2 \times R_3$	$d^n\langle\sigma\rangle(U)w^{uk}$
	$\{21^{4\ell}\}$ $\langle 2\rangle$ $^3(20)$	$w^{12},w^{14},\ldots w^{1,2\ell}$	$\langle 2\rangle^3(20)w^{12},w^{14}$
	$^3(00)$	w^{10}	$\langle 2\rangle^3(00)w^{10}$
	$^1(1^2)$	$w^{01},w^{03},\ldots w^{0,2\ell-1}$	$\langle 2\rangle^1(1^2)w^{01},w^{03}$
	$\langle 1^2\rangle$ $^3(1^2)$	$w^{11},w^{13},\ldots w^{1,2\ell-1}$	$\langle 1^2\rangle^3(1^2)w^{11},w^{13}$
	$^1(20)$	$w^{02},w^{04},\ldots w^{0,2\ell}$	$\langle 1^2\rangle^1(20)w^{02},w^{04}$
	$\{0\}$ $\langle 0\rangle$ $^1(00)$	w^{00}	$\langle 0\rangle^1(00)w^{00}$.

b) Cas des configurations $(\ell+\ell')^n$. Cas de $(d+s)^n$ dans le schéma SU_3 .

Les raisonnements précédents se généralisent point par point et permettent d'obtenir la classification des opérateurs $w^{uk}(\ell\ell')$ dans le schéma $U_{4(\ell+\ell'+1)} \supset Sp_{4(\ell+\ell'+1)} \supset SU_2\times SO_{2(\ell+\ell'+1)} \ldots$. Le seul cas qui nous intéresse ici est la classification des opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^n$ n'agissant que sur les variables orbitales, dans le schéma $SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$, classification expliquée en détail dans l'Appendice II et qui est la suivante : Une fois enlevé l'opérateur 0 , les $w^{uk}_{\pi q}(\ell,\ell')$ se transforment comme la représentation $\{21^{10}\}$ de SU_{12} . La réduction $SU_{12} \supset SU_2 \times SU_6$ décompose la

représentation $\{21^{10}\}$ suivant $\{21^{10}\} = {}^1\{21^4\}+{}^3\{21^4\}+{}^3\{0\}$ de $SU_2 \times SU_6$ où les représentations $\mathfrak{D}_S$ de SU_2 sont représentées par leur dimension $2S+1$ suivant la notation spectroscopique. Dans cette décomposition ${}^3\{0\}$ correspond aux générateurs de SU_2 ; la réduction $SU_6 \supset SU_3 \supset R_3$ décompose $\{21^4\}$ suivant :

$$\boxed{\{21^4\} = (11)P,F + (22)S,D,D',F,G} \quad ,$$

réduction qui doit permettre de classer l'ensemble des opérateurs monoélectroniques d'orbite

$$\boxed{V^1, V^2(dd), V^3(dd), V^4(dd), V^2(ds), V^2(sd), \frac{1}{\sqrt{6}}[V^0(dd) - \sqrt{5}\ V^0(ss)]}$$

correspondant à SU_6 . Les opérateurs $V^1(dd)$ et $V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}} \left\{\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2[V^2(ds) + V^2(sd)]\right\}$ forment les générateurs de SU_3 et on sait que les générateurs de SU_ν se transforment comme $\{21^{\nu-2}\}$ de SU_ν , soit ici $\{21\}$ de SU_3 , ou en notation d'Elliott (11) de SU_3 .

On a donc $(11)1 \equiv V^1(dd)$

$$(11)2 \equiv V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}} \{\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2[V^2(ds) + V^2(sd)]\} \quad .$$

Les opérateurs de rang 0, 3 et 4 sont uniques et on a directement la correspondance :

$$(22)0 \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} [V^0(dd) - \sqrt{5}\ V^0(ss)]$$

$$(22)3 \equiv V^3(dd)$$

$$(22)4 \equiv V^4(dd)$$

Il reste à trouver 2 combinaisons linéaires des $V^2(dd)$, $V^2(ds)$ et $V^2(sd)$, orthogonales à V^{+2} et qui se transforment comme $(22)2$

et $(22)2'$. Les combinaisons choisies pour des raisons que nous verrons plus loin sont :

$$(22)2 \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} \left[\sqrt{8}\ V^2(dd) - \sqrt{\frac{7}{2}}\ (V^2(ds)+V^2(sd))\right]$$

$$(22)2' \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[V^2(ds)-V^2(sd)\right] \quad .$$

On peut bien sûr inverser les relations et obtenir le développement des V^k en fonction des opérateurs à symétrie SU_3 bien déterminée.

En conclusion, l'ensemble des opérateurs monoélectroniques d'orbite $V^k(\ell\ell')$ pour les configurations $(d+s)^n$ se transforment comme les représentations $[(11)+(22)]$ de SU_3 . Avant de considérer la classification des opérateurs à 2 et 3 particules nous allons parler des propriétés d'hermiticité des opérateurs tensoriels et des opérateurs tensoriels couplés, propriétés qui nous seront tout particulièrement utiles dans le Chapitre II et sur lesquelles nous reviendrons.

5°) Hermiticité des opérateurs tensoriels.

a) Adjoint d'un opérateur linéaire - Opérateur linéaire hermitique.

A la relation entre bras et kets conjugués correspond une relation de conjugaison entre opérateurs linéaires. Dans une base orthonormée on a la relation de définition : $\langle\psi|A^\dagger|\psi'\rangle = \langle\psi'|A|\psi\rangle^* = \langle\psi'|A|\psi\rangle$ si la matrice est réelle.

Un opérateur linéaire est hermitique s'il est autoadjoint $A=A^\dagger$. Dans le cas des matrices réelles $\langle\psi|A|\psi'\rangle = \langle\psi'|A|\psi\rangle$ si A est hermitique

$\langle\psi|A|\psi'\rangle = -\langle\psi'|A|\psi\rangle$ " antihermitique.

b) Cas des opérateurs tensoriels T^k .

Un opérateur tensoriel T^k est un ensemble de $(2k+1)$ opérateurs linéaires T^k_q qui se transforment linéairement les uns avec les autres dans les opérations du groupe R_3 . L'adjoint d'une composante T^k_q est définie par :

$$\langle\psi|T^{+k}_q|\psi'\rangle = \langle\psi'|T^k_q|\psi\rangle \quad .$$

On trouve alors facilement que, par exemple,

$$V^{k+}_q = (-1)^{-q}\, V^k_{-q} \qquad \text{(tenseur agissant dans } \ell^n \text{)}$$

$$w^{\varkappa k+}_{\pi q} = (-1)^{-\pi-q}\, w^{\varkappa k}_{-\pi-q} \qquad \text{(double tenseur de } \ell^n \text{)}$$

$$V^{k+}_q(\ell\ell') = (-1)^{-\ell+\ell'-q}\, V^k_{-q}(\ell'\ell) \qquad \text{tenseur de } (\ell+\ell')^n$$

$$w^{\varkappa k+}_{\pi q}(\ell\ell') = (-1)^{-\ell+\ell'-\pi-q}\, w^{\varkappa k}_{-\pi-q}(\ell'\ell) \qquad \text{double tenseur de } (\ell+\ell')^n .$$

On définit la conjugaison hermitique des opérateurs tensoriels de la façon suivante :

S^k est l'opérateur hermitique conjugué de T^k , soit $S^k = T^{k\dagger}$, si ses composantes verifient : $S^k_q = (-1)^{p-q}\, T^{k\dagger}_{-q}$ où p est arbitraire.

Et on dira de T^k est un opérateur tensoriel "hermitique" si on a les relations : $\boxed{T^k_q = (-1)^{p-q}\, T^{k\dagger}_{-q}}$.

Deux conventions principales sont utilisées :

α) Convention de Racah $p=0$.

Elle a l'avantage de retrouver comme cas particulier pour $q=0$ la définition normale de l'hermiticité mais elle a un inconvénient:

Si on appelle T^+ un opérateur hermitique selon cette définition

et T^- " antihermitique " "

alors les produits tensoriels $\begin{matrix} T^- T^+ \\ T^- T^- \end{matrix}$ ne sont pas hermitiques.

β) Convention d'Edmonds p=k .

Alors T^k est hermitique si $T^k_q = (-1)^{k-q}\, T^{k\dagger}_{-q}$.

Avec cette définition on ne retrouve la définition normale de l'hermiticité d'un opérateur linéaire que si k est pair mais, par contre, si on appelle T^+ un opérateur tensoriel hermitique selon cette deuxième définition et T^- un opérateur antihermitique, on a :

$\left|\begin{matrix} T^+T^+ \text{ et } T^-T^- \text{ hermitiques} \\ T^+T^- \text{ antihermitique} \end{matrix}\right.$, et c'est cette convention que nous utiliserons.

Dans ces conditions les doubles tenseurs $w^{\nu k}$ sont :

$\left|\begin{matrix} \text{hermitiques si } \nu+k \text{ pair} \\ \text{antihermitiques si } \nu+k \text{ impair} \end{matrix}\right.$.

Les $w^{\nu k}(\ell\ell')$ ne sont pas d'hermiticité définie mais on peut construire $w^{\nu k^+}$ hermitique et $w^{\nu k^-}$ antihermitique en prenant

$$w^{\nu k^\pm}(\ell\ell') = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[w^{\nu k}(\ell\ell') \pm (-1)^{\nu+k-\ell+\ell'}\, w^{\nu k}(\ell'\ell)\right] .$$

Les différents types de triple produits tensoriels $\{w_i^{\nu_1 k_1} w_j^{\nu_2 k_2} w_k^{\nu_3 k_3}\}$ s'écrivent en abrégé :

$(w_i^+ w_j^+ w_k^+)^+ = w_i^+ w_j^+ w_k^+$ ils sont donc de type +

$(w_i^- w_j^- w_k^-)^+ = -w_i^- w_j^- w_k^-$ " −

$(w_i^+ w_j^- w_k^-)^+ = w_i^+ w_j^- w_k^-$ " +

$(w_i^+ w_j^+ w_k^-)^+ = -w_i^+ w_j^+ w_k^-$ " −

relations qui restent vraies pour les $w^{\mu k}(\ell\ell')$ si l'on prend les $w^{\pm}(\ell\ell')$ définies plus haut.

Nous reviendrons au Chapitre II sur les problèmes d'hermiticité des opérateurs couplés classés non pas par rapport à R_3 seulement, mais classés par rapport à SU_3 et R_3. Cependant, remarquons tout de suite que les deux combinaisons arbitraires $(22)2$ et $(22)2'$ pour les opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^n$ ont en fait été choisies de type d'hermiticité défini (au sens d'Edmonds)

$$(22)2 \equiv (22)2^+ = \alpha\, V^2(dd) + \beta\, [V^2(ds)+V^2(sd)]$$

$$(22)2' \equiv (22)2^- = \gamma\, [V^2(ds)-V^2(sd)] \quad .$$

6°) Principe de la classification des opérateurs à 2 et 3 particules.

D'après de qui a été vu à propos des pléthysmes, si l'ensemble des opérateurs monoélectroniques se transforment comme une somme $\sum_i D_i$ de représentations d'un groupe G, les opérateurs symétriques à k particules que l'on peut construire sont donnés par le pléthysme $[\sum_i D_i]\otimes\{k\}$ et la réduction de ce pléthysme détermine leurs types de symétrie possibles. Nous nous intéressons dans ce travail à 2 problèmes : d'une part l'étude des effets de corrélation sur la structure hyperfine des configurations d^N nécessite la classification des opérateurs effectifs à 2 particules dépendant du spin dans le schéma de réductions $Sp_{10} \supset SU_2 \times [SO(5) \supset R_3]$; d'autre part, on veut obtenir à l'aide du groupe SU_3 un ensemble complet d'opérateurs symétriques

classés à 3 particules indépendants du spin agissant dans les configurations $(d+s)^N$ et représentant les interactions effectives électrostatiques.

a) Classification des opérateurs biélectroniques dépendant du spin agissant dans les configurations d^n à l'aide du schéma $Sp_{10} \supset SU_2 \times [SO(5) \supset R_3]$.

On a vu que les opérateurs monoélectroniques $w^{\varkappa k}$ se transforment comme les représentations $[\langle 0\rangle + \langle 1^2\rangle + \langle 2\rangle]$ de Sp_{10} . Les opérateurs biélectroniques symétriques sont donc ceux apparaissant dans le développement du pléthysme

$$[\langle 0\rangle + \langle 1^2\rangle + \langle 2\rangle] \otimes \{2\} \quad .$$

En fait les opérateurs à 2 particules contenant w^{00} sont proportionnels à des opérateurs à 1 particule et on peut supprimer $\langle 0\rangle$ du pléthysme. Il reste à déterminer

$$[\langle 1^2\rangle + \langle 2\rangle] \otimes \{2\} \quad .$$

On a vu que les opérateurs monoélectroniques correspondant à $\langle 1^2\rangle$ vérifient $(\varkappa+k)$ pair et sont donc du type + du point de vue de l'hermiticité. De même $\langle 2\rangle$ correspond à des opérateurs de type - . Les règles de décomposition des pléthysmes rappelées dans l'Appendice I donnent immédiatement :

$[\langle 1^2\rangle + \langle 2\rangle] \otimes \{2\} = \langle 1^2\rangle \otimes \{2\} + \langle 2\rangle \otimes \{2\} + \langle 1^2\rangle\langle 2\rangle$ de type d'hermiticité : $(++)+$ $(--)-$ $(+-)-$ et les développements de chaque terme sous forme de représentations de Sp_{10}

s'obtiennent facilement. (Les deux premiers termes sont des pléthysmes connus, très simples, le troisième terme $\langle 1^2\rangle\langle 2\rangle$ est un produit de Kronecker ordinaire).

On voit que chacun des trois termes correspond à des opérateurs couplés de type d'hermiticité bien défini. Il n'en est pas de même pour le cas suivant.

b) Classification dans le schéma SU_3 des opérateurs à 3 particules indépendants du spin agissant dans les configurations $(d+s)^n$.

L'ensemble des opérateurs monoélectroniques se transforme comme les représentations $[(11)+(22)]$ de SU_3 et les opérateurs symétriques à 3 particules que l'on peut construire sont ceux apparaissant dans le pléthysme

$$[(11)+(22)]\otimes\{3\} \quad .$$

Les règles données dans l'Appendice I permettent d'écrire immédiatement

$$[(11)+(22)]\otimes\{3\} = (11)\otimes\{3\}+(22)\otimes\{3\}+[(11)\otimes\{2\}](22)+[(22)\otimes\{2\}](11) \qquad (1)$$

où la forme $[(\lambda)\otimes\{k\}](\lambda')$ signifie : produits de Kronecker par (λ') de toutes les représentations contenues dans le pléthysme $\lambda\otimes\{k\}$.

La détermination du développement de chacun des 4 produits de l'expression (1) n'est pas immédiate et est décrite dans l'appendice (I) ; elle montre comment le grand nombre de produits de Kronecker qui interviennent dans l'expression de ces pléthysmes a nécessité l'écriture d'un petit programme annexe dont nous donnons la description .

On voit apparaître une des difficultés rencontrées au Chapitre II : les opérateurs monoélectroniques appartenant à la représentation (11) sont V^{1-} et V^{+2} et ne sont donc pas de même hermiticité ; de même (22) correspond à des opérateurs V^{+0}, V^{2+}, V^{-2}, V^{-3}, V^{+4} . Chacun des 4 produits de l'expression (1) fait donc intervenir dans son développement des produits $V_i^{k_1} V_j^{k_2} V_k^{k_3}$ de type d'hermiticité quelconque et une difficulté importante, principalement dans le cas du produit $(22)\otimes\{3\}$, est la construction d'opérateurs à la fois symétriques et hermitiques. Enfin, on comprend que ces opérateurs ainsi classés ne peuvent pas s'exprimer en fonction de "triades" $V_i^{k_1} V_j^{k_2} V_k^{k_3}$ où les k_i sont tous pairs ou tous impairs ; on ne peut donc pas séparer les opérateurs effectifs de second ordre (k_i pair) de l'ensemble des opérateurs à 3 particules.

Cette discussion montre que les pléthysmes permettent de déterminer le nombre d'opérateurs à p particules de type de symétrie donné que l'on peut construire. D'après ce qu'on a vu à propos de la définition du produit de Kronecker de deux représentations et du théorème de Wigner-Eckart sous sa forme générale, on sait que les coefficients de Clebsch-Gordan permettent de construire des bases pour les représentations contenues dans les produits de Kronecker et qu'ils sont donc essentiels pour la construction explicite des opérateurs classés comme nous allons le voir maintenant.

7°) Coefficients de Clebsch-Gordan (ou en abrégé C.C.G.) et construction explicite d'opérateurs à plusieurs particules.

a) Définition générale.

Soit n fonctions $\varphi_j^{(\mu)}$, base d'une représentation irréductible $D^{(\mu)}(G)$ d'un groupe G

m fonctions $\Phi_\ell^{(\nu)}$, base d'une représentation irréductible $D^{(\nu)}(G)$ d'un groupe G .

On cherche parmi les produits $\varphi_j^{(\mu)}\ \Phi_\ell^{(\nu)}$ les fonctions $\psi_i^{(\lambda)}$ qui forment une base pour la R.I. $D^{(\lambda)}(G)$. $D^{(\lambda)}$ doit donc être contenue dans le produit de Kronecker $D^{(\mu)} \times D^{(\nu)} = \sum_{\lambda'} \alpha(\lambda')\ D^{(\lambda')}$ où $\alpha(\lambda')$ est le nombre de représentations équivalentes $D^{(\lambda')}$ qui apparaissent. Les C.C.G. sont par définition les coefficients de la transformation linéaire $\psi_i^{[\mu\times\nu]\alpha\lambda} = \sum_{j,\ell} \langle \mu j;\ \nu\ell \mid \alpha\lambda_i \rangle\ \varphi_j^{(\mu)}\ \Phi_\ell^{(\nu)}$; si α est supérieur à 1 on forme α combinaisons orthogonales arbitraires.

b) Factorisation des C.C.G. .

Un théorème dû à Racah permet de factoriser les C.C.G. lorsque les bases $\varphi_j^{(\mu)}$ des représentations $D^{(\mu)}(G)$ de G sont explicitées à l'aide des représentations irréductibles d'un sous-groupe H de G .

Soit A une R.I. de G

B " H sous-groupe de G et b une base de B .

Le théorème de factorisation de Racah s'écrit :

$$\langle A_1\beta_1 B_1 b_1; A_2\beta_2 B_2 b_2 \mid \alpha A\beta B b\rangle = \sum_{\gamma} \langle B_1 b_1; B_2 b_2 \mid \gamma B b\rangle \langle A_1\beta_1 B_1 + A_2\beta_2 B_2 \mid \alpha A\beta B\rangle$$

où $\langle A_1\beta_1 B_1 + A_2\beta_2 B_2 \mid \alpha A\beta B\rangle$ est indépendant des bases b_1, b_2, b .

- Les indices β repèrent les apparitions multiples d'une représentation B de H dans la réduction $G \supset H$.

- α et γ repèrent les apparitions multiples d'une représentation A ou B dans les produits de Kronecker $(A_1 \times A_2)$ ou $(B_1 \times B_2)$.

Les premiers caractérisent les "dégénérescences internes" et les seconds les "dégénérescences externes".

c) Théorème de W.E., C.C.G. et éléments de matrice d'opérateurs classés dans la chaîne $G \supset H$.

L'énoncé général du théorème de W.E. donné plus haut fait intervenir des coefficients de Clebsch-Gordan très généraux $\langle (\Gamma_2\Gamma_3)\beta\ \Gamma_1\rho_1 \mid \Gamma_2\rho_2\ ;\ \Gamma_3\rho_3\rangle$ où les ρ représentent des bases quelconques des représentations Γ du groupe G .

Si on suppose que les ρ caractérisent des représentations irréductibles d'un sous-groupe H de G et qu'on appelle ω leurs bases on peut écrire d'après le théorème de W.E. appliqué au groupe G :

$$\langle \gamma_1\Gamma_1\tau_1\rho_1\omega_1 \mid O(\gamma_2\Gamma_2\tau_2\rho_2\omega_2) \mid \gamma_3\Gamma_3\tau_3\rho_3\omega_3\rangle = \sum_\beta A_\beta \langle \beta\Gamma_1\tau_1\rho_1\omega_1 \mid \Gamma_2\tau_2\rho_2\omega_2\ ;\ \Gamma_3\tau_3\rho_3\omega_3\rangle$$

où A_β , indépendant des bases choisies pour les représentations de G , peut s'écrire $A_\beta = \langle \gamma_1\Gamma_1\tau_1 \,\|\, O(\gamma_2\Gamma_2\tau_2) \,\|\, \gamma_3\Gamma_3\tau_3\rangle$.

Le théorème de factorisation appliqué aux C.C.G. ci-dessus permet d'écrire :

$$\langle \beta \Gamma_1 \tau_1 \rho_1 \omega_1 | \Gamma_2 \tau_2 \rho_2 \omega_2 ; \Gamma_3 \tau_3 \rho_3 \omega_3 \rangle$$

$$= \sum_{\alpha} \langle \rho_2 \omega_2 ; \rho_3 \omega_3 | \alpha \rho_1 \omega_1 \rangle \langle \beta \Gamma_1 \tau_1 \rho_1 | \Gamma_2 \tau_2 \rho_2 + \Gamma_3 \tau_3 \rho_3 \rangle \quad .$$

L'expression obtenue finalement :

$$\langle \gamma_1 \Gamma_1 \tau_1 \rho_1 \omega_1 | O(\gamma_2 \Gamma_2 \tau_2 \rho_2 \omega_2) | \gamma_3 \Gamma_3 \tau_3 \rho_3 \omega_3 \rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \gamma_1 \Gamma_1 \tau_1 \| O(\gamma_2 \Gamma_2 \tau_2) \| \gamma_3 \Gamma_3 \tau_3 \rangle$$

$$\langle \rho_2 \omega_2 ; \rho_3 \omega_3 | \alpha \rho_1 \omega_1 \rangle \langle \beta \Gamma_1 \tau_1 \rho_1 | \Gamma_2 \tau_2 \rho_2 + \Gamma_3 \tau_3 \rho_3 \rangle \ ,$$

montre l'intérêt pour le calcul des éléments de matrice de classer opérateurs et états de base dans un même schéma de réductions.

d) Principe de la construction explicite des opérateurs à 2 et 3 particules.

- Opérateurs à 2 particules agissant dans d^n .

Les opérateurs à 2 particules, possédant des propriétés de transformation bien définies par rapport à une chaîne de groupes donnée, sont des combinaisons linéaires des produits

$$\sum_{i \neq j} \left\{ w_i^{\varkappa_1 k_1} w_j^{\varkappa_2 k_2} \right\}_{\pi q}^{\varkappa k}$$ où les $w^{\varkappa_i k_i}$ sont les opérateurs monoélectroniques considérés.

On veut construire des opérateurs à 2 particules agissant dans les configurations d^n , classés suivant la chaîne de réductions

$$\begin{matrix} Sp_{10} & \supset & SU_2(R_2) & \times & [SO(5) & \supset & R_3(R_2)] \\ \langle \sigma \rangle & & \varkappa & \pi & & u & k & q \end{matrix}$$

et construits à partir des opérateurs monoélectroniques $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ qui se transforment suivant les repré-

sentations $(\langle 2\rangle+\langle 1^2\rangle$ de Sp_{10}. D'après ce qui a été vu à propos des produits de Kronecker des représentations et des coefficients de Clebsch-Gordan les opérateurs cherchés s'écrivent $O^{\varkappa k}_{\pi q} = \sum_{i\neq j} O_{ij}{}^{\varkappa k}_{\pi q}$ où

$$O_{ij}{}^{\varkappa k}_{\pi q}(\sigma\varkappa u\tau k\pi q) = \sum_{\psi_1\psi_2} \langle \sigma_1\varkappa_1 u_1\tau_1 k_1\pi_1 q_1 ;\ \sigma_2\varkappa_2 u_2\tau_2 k_2\pi_2 q_2 | \sigma\varkappa u\tau k\pi q\rangle \; w_i{}^{\varkappa_1 k_1}_{\pi_1 q_1}\; w_j{}^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2}$$

que l'on peut écrire, d'après le théorème de factorisation

$$O_{ij}{}^{\varkappa k}_{\pi q} = \sum_{\psi_1\psi_2} \langle \sigma_1\varkappa_1 u_1 + \sigma_2\varkappa_2 u_2 \mid \sigma\varkappa u\rangle \langle u_1\tau_1 k_1 + u_2\tau_2 k_2 \mid u\tau k\rangle \left\{ w_i{}^{\varkappa_1 k_1}\; w_j{}^{\varkappa_2 k_2} \right\}^{\varkappa k}_{\pi q}$$

avec $\psi_i \equiv (\sigma_i\varkappa_i u_i\tau_i k_i)$.

Le problème est donc résolu si l'on sait calculer les coefficients de Clebsch-Gordan nécessaires à la construction des opérateurs $O_{ij}(\sigma\varkappa u\tau k\pi q)$ apparaissant dans le pléthysme $(\langle 2\rangle+\langle 1^2\rangle)\otimes\{2\}$.

- <u>Opérateurs à 3 particules agissant dans $(d+s)^n$</u> .

De même les opérateurs à 3 particules symétriques, scalaires, indépendants du spin qui nous intéressent, agissant à l'intérieur des configurations $(d+s)^n$ et classés suivant le schéma de réductions $Sp_{12} \supset SU_2(R_2)\times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3(R_2)]$, sont des combinaisons linéaires
$\sigma \quad k \quad q$
des produits $\left\{ V_i^{k_1}\; V_j^{k_2} \right\}^{k_3} . V_k^{k_3}$ où les V_i^k sont les opérateurs mono-électroniques qui se transforment suivant les représentations $[(11)+(22)]$. Un opérateur à 3 particules possédant des propriétés de transformation bien définies s'écrit :

$$\sum_{\psi_1\psi_2} \langle \sigma_1\tau_1 k_1 + \sigma_2\tau_2 k_2 \mid \alpha'\sigma'\tau' k_3 \rangle \langle \sigma'\tau' k_3 + \sigma_3\tau_3 k_3 \mid \alpha\sigma\tau 0 \rangle \sum_{i\neq j\neq k} \left\{ [V_i^{k_1} V_j^{k_2}]^{k_3} V_k^{k_3} \right\}^0$$

où les C.C.G. à calculer sont ceux nécessaires à la construction des opérateurs $O_{ij}[(\sigma_1\sigma_2)\ \alpha\sigma\tau 0]$ apparaissant dans le pléthysme $[(11)+(22)]\otimes\{3\}$.

En fait la construction des opérateurs à 2 et 3 particules n'est pas résolue par la seule détermination des C.C.G. qui interviennent dans les expressions des opérateurs classés. Les opérateurs cherchés doivent aussi être hermitiques et symétriques et sont eux-mêmes des combinaisons linéaires des opérateurs classés $O_{ij}[(\sigma_1\sigma_2)\ \alpha\sigma\tau 0]$. Si la symétrisation des opérateurs à 2 particules ne présente pas de difficulté , celle des opérateurs à 3 particules peut devenir plus complexe comme nous le verrons au chapitre II.

VI. Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan des groupes semi-simples compacts.

On a vu, dans le cas d'un groupe semi-simple compact, que l'opérateur quadratique G, défini à partir du tenseur métrique, $G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma$, et appelé opérateur de Casimir, commute avec tous les générateur du groupe et, qu'en conséquence, il est représenté par un opérateur multiple de l'identité dans toute représentation irréductible. Cette propriété a permis à Nutter et Nielson de proposer une méthode de calcul des coefficients de parenté fractionnelle de f^N dont le principe peut être adapté au cas plus général de la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan des groupes compacts semi-simples dans leurs réductions successives à R_3, et qui se prête relativement bien au calcul automatique.

- Valeurs propres de l'opérateur de Casimir.

Si les opérateurs infinitésimaux sont sous la forme standard H_i, E_α et normalisés de telle sorte que $g_{\alpha-\alpha} = 1$ alors $G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma$ s'écrit :

$$G = g^{ik} H_i H_k + \sum_\alpha E_\alpha E_{-\alpha} \quad .$$

Si L est le poids le plus haut d'une représentation irréductible et u le vecteur propre correspondant à ce poids on a

$$Gu = g^{ik} L_i L_k u + \sum_{\alpha^+} (E_\alpha E_{-\alpha}) u$$

où les α^+ sont les racines positives telles que $E_{\alpha^+} u = 0$ ou telles que le premier α_i soit >0 .

Si on pose $\begin{cases} R = \frac{1}{2} \sum_{\alpha^+} \alpha \\ K = L + R \end{cases}$ on trouve alors que $Gu = (K^2 - R^2)u$.

Les valeurs propres de l'opérateur de Casimir pour toute représentation irréductible du groupe considéré sont donc connues à priori.

- Propriété de l'opérateur G et principe de la méthode.

Considérons une chaîne de réductions ... $P \supset H \supset R_3$

dont les représentations ... W, U, L définissent les états de base.

Supposons que les états soient complètement caractérisés par W, U, L.

Les C.C.G. pour le groupe P sont définis par :

$$|(W_1W_2)WUL\rangle = \sum_{\substack{U_1L_1 \\ U_2L_2}} \langle W_1U_1L_1 + W_2U_2L_2 | (W_1W_2)WUL\rangle |W_1U_1L_1\rangle |W_2U_2L_2\rangle \quad .$$

Le théorème de factorisation permet d'écrire :

$$|(W_1W_2)WUL\rangle = \sum_{\substack{U_1L_1 \\ U_2L_2}} \langle W_1U_1 + W_2U_2 | (W_1W_2)WU\rangle \langle U_1L_1 + U_2L_2 | UL\rangle \; |W_1U_1L_1\rangle \; |W_2U_2L_2\rangle$$

Mais $\sum_{L_1L_2} \langle U_1L_1 + U_2L_2 | UL\rangle \; |\ldots U_1L_1\rangle \; |\ldots U_2L_2\rangle = |(..U_1..U_2)UL\rangle$

ce qui donne

$$|(W_1W_2)WUL\rangle = \sum_{U_1U_2} \langle W_1U_1 + W_2U_2 | (W_1W_2)WU\rangle \; |(W_1U_1, W_2U_2)UL\rangle \qquad (1)$$

On peut considérer un état $|(W_1W_2)WUL\rangle$ comme un état de base correspondant à la réduction $[P^{(1)} \times P^{(2)}] \supset P \supset H \supset R_3$ où $P^{(1)} \times P^{(2)}$ est un produit direct.

Les opérateurs infinitésimaux X du groupe P s'écrivent alors :

$$X(P) = X(P^{(1)}) + X(P^{(2)}) \quad .$$

En particulier l'opérateur de Casimir G s'écrit en fonction des opérateurs infinitésimaux des deux espaces $P^{(1)}$ et $P^{(2)}$

$$G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma = g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(1)} + g^{\rho\sigma} X_\rho^{(2)} X_\rho^{(2)} + 2g^{\rho\sigma} X_\rho^1 X_\rho^2$$

soit $$G = G^{(1)} + G^{(2)} + 2g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(2)} \quad . \qquad (2)$$

Le principe de la méthode de Nutter et Nielson consiste à évaluer de 2 façons différentes les éléments de matrice de l'opérateur de Casimir G .

On sait d'une part que $G|(W_1W_2)WUL\rangle = G(W)|(W_1W_2)WUL\rangle$

$$G^{(1)}|(W_1W_2)WUL\rangle = G(W_1)|(W_1W_2)WUL\rangle$$

$$G^{(2)}|(W_1W_2)WUL\rangle = G(W_2)|(W_1W_2)WUL\rangle$$

où les $G(W)$ sont les valeurs propres de l'opérateur de Casimir pour les représentations W .

On peut donc écrire :

$$[G - G^{(1)} - G^{(2)}]|(W_1W_2)WUL\rangle = [G(W) - G(W_1) - G(W_2)]|(W_1W_2)WUL\rangle \qquad (3)$$

ou encore, en développant les états $|(W_1W_2)WUL\rangle$ à l'aide de la relation (1)

$$[G-G^{(1)}-G^{(2)}]|(W_1W_2)WUL\rangle = [G(W)-G(W_1)-G(W_2)] \sum_{U_1U_2} \langle W_1U_1 + W_2U_2|WU\rangle \; |(W_1U_1, W_2U_2)UL\rangle \quad . \qquad (3)$$

D'autre part, la relation (2) donne aussi

$$[G - G^{(1)} - G^{(2)}] = 2g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(2)} \qquad \text{soit}$$

$$[2g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(2)}] \sum_{U_1 U_2} \langle W_1 U_1 + W_2 U_2 | WU \rangle \, | (W_1 U_1, W_2 U_2) UL \rangle \quad . \qquad (4)$$

En utilisant la relation de fermeture pour faire agir l'opérateur $2g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(2)}$ sur $|(W_1 U_1, W_2 U_2) UL\rangle$ et en égalant les développements obtenus (3) et (4) on obtient les systèmes d'équations :

$$[G(W) - G(W_1) - G(W_2)] \langle W_1 U_1 + W_2 U_2 | (W_1 W_2) WU \rangle = \sum_{\substack{U'_1 U'_2 \\ U' L'}} \langle W_1 U'_1 + W_2 U'_2 | (W_1 W_2) WU \rangle$$

$$\langle (W_1 U_1, W_2 U_2) UL | 2g^{\rho\sigma} X_\rho^{(1)} X_\sigma^{(2)} | (W_1 U'_1, W_2 U'_2) U'L' \rangle \qquad (5)$$

Pour chaque cas considéré on sait déterminer le tenseur métrique et l'opérateur de Casimir. Une fois calculés les éléments de matrice des X_σ entre les états de départ $\langle (W_1 U_1, W_2 U_2) UL|$ les équations (5) définissent des systèmes linéaires par ensemble $(W_1 W_2) WU$ donné, dont les inconnues sont les C.C.G. $\langle W_1 U_1 + W_2 U_2 | (W_1 W_2) WU \rangle$ cherchés.

Comme nous le verrons au Chapitre III, la factorisation des C.C.G. permet de les calculer de façon récurrente. Ainsi le calcul des C.C.G. de la réduction $P \supset H$, à l'aide des systèmes (5), suppose en fait la détermination préalable des C.C.G. de la réduction $H \supset R_3$ nécessaires pour évaluer les éléments de matrice des opérateurs X_σ de P .

On peut tout de suite voir que la méthode présente un inconvénient. Si W apparaît α fois dans le produit $W_1 \times W_2$ et si U apparaît β fois dans la réduction $P \supset H$ le système est $\alpha \times \beta$ fois dégénéré et mélange donc dégénérescence externe et interne. Dans une première étape de calcul on détermine $\alpha \times \beta$ solutions orthonormées arbitraires, c'est le rôle du programme CLEGAC ; la recombinaison éventuelle des solutions dépend ensuite du problème particulier traité.

Le critère pour s'affranchir de la dégénérescence externe est que la matrice des générateurs du groupe P doit être diagonale en W , c'est-à-dire que les états $|(W_1 W_2)\alpha W \beta U\rangle$ doivent respecter $\langle(W_1 W_2)\alpha W \beta U| \; X \; |(W_1 W_2)\alpha' W' \beta' U'\rangle = 0$ si $\alpha \neq \alpha'$. La dégénérescence interne, par contre, liée à l'indétermination des vecteurs de base dans les réductions successives ne peut, en général, être résolue systématiquement.

PLAN DU CHAPITRE II.

Introduction.

1ère partie : Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan (C.C.G.) $SU_3 \supset R_3$.

I) C.C.G. intervenant dans l'expression des opérateurs à 2 et 3 particules. Tableaux des résultats.

II) Propriétés de symétrie et dégénérescence externe.

III) Liens entre l'hermiticité des opérateurs tensoriels couplés et la levée partielle des dégénérescences internes.

1°) Hermiticité d'un opérateur tensoriel.

2°) Opérateurs tensoriels couplés agissant dans R_3 .

3°) Conséquences pour les opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^n$ classés / $SU_3 \supset R_3$

4°) Conjugaison hermitique pour un opérateur quelconque classé de $SU_3 \supset R_3$

5°) Application aux opérateurs couplés classés dans $SU_3 \supset R_3$.

IV) Comparaison entre les différentes bases $SU_3 \supset R_3$.

1°) Problème de la caractérisation complète des vecteurs de base de SU_n .

2°) Bases d'états définis par Judd, Miller, Patera, Winternitz.

- Expressions des L_i et T_j en fonction des V_q^1 et V_q^{+2} .
- Expression tensorielle de l'invariant $X^{(3)}$.
- Etude de la base obtenue par diagonalisation de $X^{(3)}$.
- Etude de l'invariant $X^{(4)}$.

3°) Conclusions de la discussion des états $SU_3 \supset R_3$.

2ème partie : Classification des opérateurs effectifs à 3 particules agissant dans $(d+s)^n$.

A) Classification formelle.

1°) Nombre d'opérateurs symétriques.

2°) Opérateurs symétriques et hermitiques.

B) Détermination explicite des opérateurs.

I) Cas $[(11)\otimes\{2\}](22)$ - 7 opérateurs.

II) Cas $[(22)\otimes\{2\}](11)$ - 10 opérateurs.

III) Cas $[(11)\otimes\{3\}]$ - 2 opérateurs.

IV) Cas $[(22)\otimes\{3\}]$ - 15 opérateurs.

1°) Séparation des parties hermitiques et antihermitiques.

2°) Principe de la symétrisation.

3°) Détermination explicite des opérateurs.

4°) Tableau récapitulatif des 15 opérateurs $(22)\otimes\{3\}$.

C) Conclusions à propos de la détermination des 34 opérateurs à 3 particules.

CHAPITRE II

Classification et détermination des opérateurs scalaires à 3 particules dans $(d+s)^N$. Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan de la réduction $SU_3 \supset R_3$.

Introduction.

1°) Nécessité des calculs au second ordre et des opérateurs effectifs.

L'approximation du champ central au premier ordre de perturbation, sur une configuration ou un petit groupe de configurations proches, permet une première interprétation des spectres atomiques à l'aide d'un petit nombre de paramètres ajustables. Les méthodes nécessaires à ce calcul, développées par Racah et Judd, utilisent la théorie des groupes de Lie pour classer les états des configurations ℓ^N et reposent essentiellement sur l'utilisation de notions telles que les opérateurs tensoriels, les coefficients de parenté fractionnelle, les coefficients de couplage (C.C.G.) et de recouplages (nj). Pour réduire l'écart théorie-expérience et améliorer les fonctions d'onde obtenues l'estimation des effets des interactions des configurations lointaines,

c'est-à-dire l'introduction du second ordre de perturbation devenait nécessaire ; mais apparaissait alors une difficulté fondamentale : celle de paramétriser un problème sur une base infinie. On sait que Rajnak et Wybourne (1963, 1964) ont alors montré qu'on peut tenir compte de ces interactions par l'introduction d'opérateurs effectifs à plusieurs particules, méthode explicitée et développée par Judd (1967, 1970) et qui permet de ne pas étendre la base de calculs, les opérateurs effectifs agissant entre états de la configuration étudiée.

Pour que cette méthode ait un sens, il faut pouvoir considérer soit une configuration relativement bien isolée, soit un groupe de configurations proches, mélangées, séparées par des énergies suffisamment petites par rapport à la séparation des termes, pour qu'il soit possible, et même nécessaire, de les considérer comme une seule entité. En physique atomique c'est le cas notamment des configurations $(d+s)^N$ et $(d+s)^N p^M$ des éléments de transition et, comme il l'a été dit dans l'introduction générale, les calculs faits par différents auteurs sur certaines de ces configurations, ont mis en évidence l'importance des effets de second ordre et notamment les effets électrostatiques.

2°) Choix d'une base de calcul adaptée au traitement des configurations mélangées.

La même situation de configurations groupées se présente en physique nucléaire et a amené Elliott (1958) à trouver une méthode de classification des configurations mélangées à l'aide de groupes de

transformations plus généraux que ceux de Racah, permettant de classer l'ensemble des états $(d+s)^N$. Comme il le fait remarquer dans son article, les méthodes développées par Racah sont tellement puissantes qu'on peut suivre le schéma tracé et le généraliser au cas des configurations mélangées. Mais la réalisation n'est pas simple pour autant et, de plus, Elliott s'est intéressé seulement à la classification des états, alors qu'on a vu au Chapitre I la nécessité, pour évaluer les éléments de matrices, de classer états et opérateurs dans un même schéma de réduction.

La généralisation la plus directe pour l'étude des configurations $(\ell+\ell')^N$, c'est-à-dire celle conduisant à la généralisation systématique des différentes notions introduites pour ℓ^N est l'utilisation du schéma :

$$U_{4(\ell+\ell'+1)} \supset SU_{4(\ell+\ell'+1)} \supset Sp_{4(\ell+\ell'+1)} \supset SU_2 \times [SO_{2(\ell+\ell'+1)} \supset SO_{2\ell+1}(\supset R_3) \times SO_{2\ell'+1}(\supset R_3) \supset R_3]$$

étudiée dans sa thèse par S. Feneuille qui a généralisé, par exemple, des notions telles que la séniorité, le quasi-spin, les coefficients de parenté fractionnelle. Ainsi un des schémas de réduction possible pour $(d+s)^N$ est $U_{12}(d+s) \supset SU_{12} \supset Sp_{12} \supset SU_2 \times [SO_6 \supset SO_5 \supset R_3]$.

En spectroscopie nucléaire, le schéma proposé par Elliott $SU_{12}(d+s) \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$ est un couplage de base plus proche des états nucléaires réels et en physique atomique S. Feneuille et A. Crubellier (1970) ont montré l'intérêt, pour l'étude des

configurations $(d+s)^N p^M$ d'utiliser la réduction $[SU_3(d+s) \times SU_3(p)] \supset SU_3 \supset R_3$, choix qui nécessite au préalable l'étude complète de $(d+s)^N$ dans le schéma SU_3 .

3°) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan de $SU_3 \supset R_3$.

Pour illustrer leurs propos, S. Feneuille et A. Crubellier n'ont classé, déterminé et introduit explicitement dans quelques exemples que les opérateurs effectifs, biélectroniques, scalaires, indépendants du spin, ne faisant intervenir qu'un très petit nombre de coefficients de Clebsch-Gordan.

Pour pouvoir tenir compte au moins de l'ensemble des interactions effectives électrostatiques, considérées comme prépondérantes, il faut pouvoir introduire les opérateurs scalaires à 3 particules, c'est-à-dire, et c'est notre but ici, avoir d'abord classé et déterminé explicitement dans le schéma SU_3 les opérateurs effectifs à 3 corps scalaires hermitiques, symétriques et indépendants du spin agissant dans $(d+s)^N$. Cela suppose la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan (C.C.G.) intervenant dans le couplage des opérateurs monoélectroniques en opérateurs biélectroniques de rang quelconque et en opérateurs à trois particules de rang nul. Une difficulté majeure est alors la très grande masse de calculs nécessaires ; le grand nombre de C.C.G. qui interviennent nous a amené à décider l'écriture d'un programme "CLEGAC" de calcul, sous forme exacte, des C.C.G. des groupes de Lie compacts semi-simples, programme décrit au Chapitre IV, basé sur la méthode dont le principe général a été exposé au Chapitre I .

4°) Travail présenté dans ce chapitre.

Dans la première partie du chapitre sont étudiés différents problèmes théoriques posés par la détermination des C.C.G. $SU_3 \supset R_3$. En effet, une autre difficulté essentielle de ce travail vient des indéterminations dans la définition des C.C.G. lorsqu'il apparaît des problèmes de dégénérescence, difficulté liée directement avec la caractérisation incomplète des vecteurs de base dans la réduction $SU_3 \supset R_3$, plusieurs vecteurs de même L pouvant appartenir à une même représentation de SU_3 .

De nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre ce problème dont aucune n'est complètement satisfaisante pour notre étude. A ce propos nous comparons nos résultats avec ceux obtenus par Judd, Miller, Patera, Winternitz (1974) qui caractérisent les états à l'aide des valeurs propres d'invariants qu'ils ont déterminés.

Cette première partie montre la possibilité de réduire la dégénérescence interne $SU_3 \supset R_3$ grâce à la définition d'opérateurs présentant des propriétés d'hermiticité, propriétés qui nous ont permis, dans la seconde partie du chapitre, de construire plus facilement un ensemble complet d'opérateurs à trois particules, scalaires, hermitiques et symétriques, représentant les interactions effectives électrostatiques dans $(d+s)^N$.

1ère partie : Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $SU_3 \supset R_3$.

I) C.C.G. intervenant dans l'expression des opérateurs à 2 et 3 particules.

L'étude des configurations $(d+s)^n$ dans la chaîne de réductions $SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$, décrite de façon succinte dans le premier chapitre est exposée de façon plus détaillée dans l'Appendice II. On trouve, en particulier pour l'opérateur de Casimir G de $SU_3(d+s)$ l'expression suivante en fonction des générateurs V^1 et V^{+2} :

$$G = \frac{5}{6}[V^1.V^1 + V^{+2}.V^{+2}] \quad \text{où} \quad V^1 = V^1(dd) = \frac{1}{\sqrt{10}} L$$

$$\text{et} \quad V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}}[\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2(V^2(ds) + V^2(sd))]$$

V^1 et V^{+2} se transforment comme la représentation (11) de SU_3 en notation d'Elliott ; les valeurs propres de l'opérateur G pour une représentation $(\sigma_1\sigma_2)$ de SU_3 sont données par

$$G(\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{9}[\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_1\sigma_2 + 3\sigma_1 + 3\sigma_2] \quad . \qquad (1)$$

1°) C.C.G. nécessaires à la classification des opérateurs à 2 particules indépendants du spin.

La construction des opérateurs à 3 particules nécessite de déterminer d'abord les C.C.G. permettant d'exprimer un opérateur classé à 2 particules de rang quelconque. L'ensemble des opérateurs

monoélectroniques agissant dans l'espace d'orbite des configurations $(d+s)^n$ se transforment comme les représentations (11) et (22) de SU_3. On a vu dans le même chapitre qu'un opérateur à 2 particules construit à partir des opérateurs monoélectroniques $(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}$ et $(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}$ et se transformant comme $\lambda\tau k$ s'écrit :

$$[(\lambda_1\lambda_2)\alpha\lambda\tau]\, O_{ij}^{k} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | \alpha\lambda\tau k\rangle \, [(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}]^{k} \quad .(2)$$

Les C.C.G. à déterminer pour notre étude sont ceux pour lesquels λ_1 ou $\lambda_2 = (11)$ ou (22), les τ_i repèrent les valeurs de k_i identiques apparaissant dans la décomposition d'une représentation λ sous la réduction $SU_3 \supset R_3$, les différentes représentations λ possibles sont celles apparaissant dans les produits de Kronecker $\lambda_1 \times \lambda_2$ et α repère les λ multiples. Suivant la méthode de calcul des C.C.G. choisie, décrite dans le Chapitre I, on fait agir l'opérateur G sur les 2 membres de l'équation (3)

$$|(\lambda_1\lambda_2)\alpha\lambda\tau k\rangle = \sum_{t_1 k_1, \tau_2 k_2} \langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | \alpha\lambda\tau k\rangle |\lambda_1\tau_1 k_1, \lambda_2\tau_2 k_2, k\rangle \quad . \qquad (3)$$

Plus précisément :

si on écrit que $V^K = V_1^K + V_2^K$ on obtient

$$G = \frac{5}{6}\left[\sum_{K=1,2} V_1^K . V_1^K + V_2^K . V_2^K + 2V_1^K . V_2^K\right]$$

Soit $$G - G^{(1)} - G^{(2)} = \frac{5}{3}\left[V_1^1 . V_2^1 + V_1^{+2} . V_2^{+2}\right] \quad .$$

L'action de chacun des 2 membres de cette expression sur chacun des 2 membres de l'équation (3) montre que les C.C.G. cherchés sont solutions des équations linéaires :

$$\left[-G(\lambda)+G(\lambda_1)+G(\lambda_2)+\frac{1}{12}k(k+1)-\frac{1}{12}k_1(k_1+1)-\frac{1}{12}k_2(k_2+1)\right]\langle\lambda_1\tau_1k_1+\lambda_2\tau_2k_2|\alpha\lambda\tau k\rangle$$

$$+\frac{5}{3}\sum_{\substack{\tau'_1k'_1\\ \tau'_2k'_2}}(-1)^{k'_1+k_2+k}\begin{Bmatrix} k'_1 & k_2 & k\\ k_2 & k_1 & 2\end{Bmatrix}\langle\lambda_1\tau_1k_1||V^{+2}||\lambda_1\tau'_1k'_1\rangle\langle\lambda_2\tau_2k_2||V^{+2}||\lambda_2\tau'_2k'_2\rangle\times$$

$$\langle\lambda_1\tau'_1k'_1+\lambda_2\tau'_2k'_2|\alpha\lambda\tau k\rangle = 0 \quad . \qquad (4)$$

Les éléments de matrice réduits nécessaires ici sont les éléments de l'opérateur $(11)V^{+2}$ entre les états des représentations (11) et (22) de SU_3 . Leur calcul est explicité dans l'Appendice II et nous en rappelons seulement le principe : le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire que le commutateur d'un opérateur V^k_q et d'un opérateur classé $\{\lambda_1\tau_1\}^{k_1}_{q_1}$ s'écrit :

$$\left[V^k_q, \{\lambda_1\tau_1\}^{k_1}_{q_1}\right] = \sum_{\lambda_2\tau_2k_2q_2}(-1)^{k_2-q_2}\begin{pmatrix} k & k_1 & k_2\\ q & q_1 & -q_2\end{pmatrix}$$

$$\langle\lambda_1\tau_1k_1||V^k||\lambda_2\tau_2k_2\rangle\ \{\lambda_2\tau_2\}^{k_2}_{q_2} \qquad (a)$$

où la somme sur λ_2 disparaît si le V^k_q considéré est un générateur du groupe.

D'autre part les V^k_q vérifient les relations de commutation générales:

$$\left[V^{k_1}_{q_1}(\ell_a\ell_b), V^{k_2}_{q_2}(\ell_c\ell_d)\right] = \sum_{k_3q_3}(-1)^{k_3+q_3}([k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3\\ q_1 & q_2 & -q_3\end{pmatrix}\times$$

$$\left\{\delta(\ell_b,\ell_c)(-1)^{\ell_a+\ell_d+k_1+k_2}\begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3\\ \ell_d & \ell_a & \ell_b\end{Bmatrix}V^{k_3}_{q_3}(\ell_a\ell_d)\right.$$

$$\left.-\delta(\ell_a\ell_d)(-1)^{\ell_b+\ell_a+k_3}\begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3\\ \ell_c & \ell_b & \ell_a\end{Bmatrix}V^{k_3}_{q_3}(\ell_c\ell_b)\right\} \quad . \qquad (b)$$

La comparaison de ces 2 développements permet de déterminer les éléments de matrice cherchés $\langle(11)\tau_1 k_1 \| V^{+2} \|(11)\tau_2 k_2\rangle$ et $\langle(22)\tau_1 k_1 \| V^{+2} \|(22)\tau_2 k_2\rangle$.

On dispose alors des données nécessaires à la construction, par le programme CLEGA1, des systèmes linéaires par valeurs de $(\lambda_1\lambda_2)\lambda k$ données vérifiés par les C.C.G. cherchés, systèmes dont les coefficients des inconnues sont donnés par l'équation (4) et sont calculés sous forme numérique exacte $N\sqrt{M}/P$, N,M,P entiers.

Les différents cas qui apparaissent sont déterminés par les réductions des produits de Kronecker suivantes :

$(11)(11) = (00),(22),2\times(11),(03),(30)$

$(11)(22) = 2\times(22),(11),(03),(30),(14),(41),(33)$

$$(22)(22) = (00),3\times(22),2\times(11),\underset{(30)}{(03)},\underset{(60)}{(06)},\underset{(41)}{(14)},\underset{(41)}{(14)},\underset{(33)}{(33)},\underset{(52)}{(25)},(44)$$

et les réductions $SU_3 \supset R_3$ des différentes représentations λ :

(00)0

(11)1,2

(22)0,2,2',3,4

(33)1,2,3,3',4,4',5,6

(44)0,2,3,4,5,6,7,8
2' 4'5'6'
4"

(03)
(30) } 1,3

(14)
(41) } 1,2,3,4,5

(06)
(60) } 0,2,4,6

(25)
(52) } 1,2,3,4,5,6,7
3' 5'

Le programme CLEGA2 résoud sous forme exacte les systèmes linéaires obtenus ; dans les cas p fois dégénérés il détermine p solutions

arbitraires orthonormées qui forment une première étape de calcul des C.C.G. . La deuxième étape consiste à choisir au mieux les solutions définitives et le paragraphe suivant est consacré à l'étude des différents cas de dégénérescence rencontrés. Nous supposons pour l'instant que ces problèmes sont résolus et que nous disposons de l'ensemble des C.C.G. nécessaires pour exprimer les opérateurs à 2 particules définis par l'équation (2), C.C.G. portés dans le tableau de résultats I.

2°) C.C.G. nécessaires à la classification des opérateurs scalaires à 3 particules.

On a vu qu'un opérateur à 2 particules $S_{ij}^{k'}$ construit à partir des opérateurs monoélectroniques $(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}$ et $(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}$ et se transformant comme $\lambda'\tau'k'$ s'écrit :

$$[(\lambda_1\lambda_2)\alpha'\lambda'\tau'] S_{ij}^{k'} = \sum_{\substack{\tau_1 k_1 \\ \tau_2 k_2}} \langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | \alpha'\lambda'\tau'k' \rangle \; [(\lambda_1\tau_1)\, V_i^{k_1}\, (\lambda_2\tau_2)\, V_j^{k_2}]^{k'} .$$

De même, un opérateur à 3 particules $T_{ij\ell}^{k}$, se transformant comme $\lambda\tau k$ et construit à partir des opérateurs monoélectroniques $(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}$, $(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}$, $(\lambda_3\tau_3)V_\ell^{k_3}$ peut s'écrire :

$$[((\lambda_1\lambda_2)\alpha'\lambda', \lambda_3\tau_3)\alpha\lambda\tau] T_{ij\ell}^{k} = \sum_{\substack{\tau'k' \\ \tau_3 k_3}} \langle \alpha'\lambda'\tau'k' + \lambda_3\tau_3 k_3 | \alpha\lambda\tau k \rangle \; \left\{(\lambda_1\lambda_2)\alpha'\lambda'\tau' S_{ij}^{k'}, (\lambda_3\tau_3)V_\ell^{k_3}\right\}^{k}$$

$$= \sum_{\substack{\tau'k'\tau_3 k_3 \\ \tau_1 k_1 \tau_2 k_2}} \langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | \alpha'\lambda'\tau'k' \rangle \langle \alpha'\lambda'\tau'k' + \lambda_3\tau_3 k_3 | \alpha\lambda\tau k \rangle \; \left\{[(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}]^{k'} (\lambda_3\tau_3)V^{k_3}\right\}^{k} .$$

On ne s'intéresse qu'aux opérateurs scalaires, soit finalement à des opérateurs du type :

$$[((\lambda_1\lambda_2)\alpha'\lambda',\lambda_3\tau_3)\alpha\lambda\tau]T^0_{ij\ell} = \sum_{\substack{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \\ \tau'}} \langle\lambda_1\tau_1 k_1+\lambda_2\tau_2 k_2|\alpha'\lambda'\tau' k_3\rangle$$

$$\langle\alpha'\lambda'\tau' k_3+\lambda_3\tau_3 k_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle$$

$$\left\{[(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}]^{k_3}(\lambda_3\tau_3)V_\ell^{k_3}\right\}^0 \quad . \quad (5)$$

Les coefficients $\langle\lambda_1\tau_1 k_1+\lambda_2\tau_2 k_2|\alpha'\lambda'\tau' k_3\rangle$ sont les C.C.G. calculés précédemment ; il reste à déterminer les coefficients $\langle\alpha'\lambda'\tau' k_3+\lambda_3\tau_3 k_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle$ où les λ' sont l'ensemble des représentations classant les opérateurs à 2 particules et où $\lambda_3 = (11)$ ou (22). Parmi les réductions des différents produits de Kronecker $(\lambda')\times(\lambda_3) = \sum_\lambda \alpha_\lambda(\lambda)$, les cas intéressants sont les représentations possédant un état S et on a finalement les possibilités suivantes à considérer :

$\lambda' \times (22) \to \sum_{\lambda} (\lambda)0$						
$(00)\times(22)$		$(22)0$				
$(11)\times(22)$		$(22)0$				
		$(22)0$				
$(03)\times(22)$		$(22)0$				
$(30)\times(22)$		$(22)0$				
$(22)\times(22)$	$(00)0$	$(22)0$	$(06)0$	$(44)0$		
		$(22)0$	$(60)0$			
		$(22)0$				
$(14)\times(22)$		$(22)0$	$(06)0$	$(44)0$		
		$(22)0$				
$(41)\times(22)$		$(22)0$	$(60)0$	$(44)0$		
		$(22)0$				
$(06)\times(22)$		$(22)0$		$(44)0$	$(28)0$	
$(60)\times(22)$		$(22)0$		$(44)0$	$(82)0$	
$(33)\times(22)$		$(22)0$	$(06)0$	$(44)0$		
		$(22)0$	$(60)0$	$(44)0$		
$(25)\times(22)$		$(22)0$	$(06)0$	$(44)0$	$(28)0$	
				$(44)0$		
$(52)\times(22)$		$(22)0$	$(60)0$	$(44)0$	$(82)0$	
				$(44)0$		
$(44)\times(22)$		$(22)0$	$(06)0$	$(44)0$	$(28)0$	$(66)0$
			$(60)0$	$(44)0$	$(82)0$	
				$(44)0$		

$\lambda' \times (11) \to \sum_{\lambda} (\lambda)0$				
$(11)\times(11)$	$(00)0$	$(22)0$		
$(03)\times(11)$		$(22)0$		
$(30)\times(11)$		$(22)0$		
$(22)\times(11)$		$(22)0$		
		$(22)0$		
$(14)\times(11)$		$(22)0$	$(06)0$	
$(41)\times(11)$		$(22)0$	$(60)0$	
$(06)\times(11)$			$(06)0$	
$(60)\times(11)$			$(60)0$	
$(33)\times(11)$		$(22)0$		$(44)0$
$(25)\times(11)$			$(06)0$	$(44)0$
$(52)\times(11)$			$(60)0$	$(44)0$
$(44)\times(11)$				$(44)0$
				$(44)0$

TABLE 1

On montre d'une façon tout à fait analogue au cas précédent que les C.C.G. cherchés $\langle\lambda'\tau_\mu k_3+\lambda_3\tau_3k_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle$ sont les solutions des systèmes d'équation linéaires :

$$[G(\lambda)-G(\lambda')-G(\lambda_3)]\langle\lambda'\tau_\mu k_3+\lambda_3\tau_3k_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle - \frac{5}{3}\sum_{\tau'_3\tau'_\mu k'_3}\langle\lambda'\tau'_\mu k'_3+\lambda_3\tau'_3k'_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle$$

$$\sum_K (-1)^{k'_3+k_3}\begin{Bmatrix} k'_3 & k'_3 & 0\\ k_3 & k_3 & K\end{Bmatrix}\langle\lambda'\tau_\mu k_3\|V^K\|\lambda'\tau'_\mu k'_3\rangle\langle\lambda_3\tau_3k_3\|V^K\|\lambda_3\tau'_3k'_3\rangle = 0 \qquad (6)$$

où V^K est égal soit à $(11)V^1$, soit à $(11)V^{+2}$.

λ_3 est égal à (11) ou (22), donc les éléments $\langle\lambda_3\phi_3\|V^{+2}\|\lambda_3\phi'_3\rangle$ sont connus. Il faut par contre déterminer les éléments de matrice $\langle\lambda'\tau_\mu k_3\|V^{+2}\|\lambda'\tau'_\mu k'_3\rangle$ à l'aide des C.C.G. précédents.

On démontre facilement la formule suivante :

$$\langle(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k\|V^K\|(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha'\lambda'\tau'k'\rangle = \sum_{\substack{\tau_1k_1\tau_2k_2\\ \tau'_1k'_1\tau'_2k'_2}}\langle\lambda_1\tau_1k_1+\lambda_2\tau_2k_2|\alpha\lambda\tau k\rangle$$

$$\langle\lambda_1\tau'_1k'_1+\lambda_2\tau'_2k'_2|\alpha'\lambda'\tau'k'\rangle\sqrt{[k][k']}\,(-1)^K$$

$$\Big[\delta(\phi_2,\phi'_2)(-1)^{k'_1+k_2+k'}\begin{Bmatrix} k & K & k'\\ k'_1 & k_2 & k_1\end{Bmatrix}\langle\lambda_1\tau_1k_1\|V^K\|\lambda_1\tau'_1k'_1\rangle +$$

$$\delta(\phi_1,\phi'_1)(-1)^{k_1+k'_2+k}\begin{Bmatrix} k & K & k'\\ k'_2 & k_1 & k_2\end{Bmatrix}\langle\lambda_2\tau_2k_2\|V^K\|\lambda_2\tau'_2k'_2\rangle\Big] \qquad (7)$$

où les $\langle\lambda_i\phi_i\|V^K\|\lambda_i\phi'_i\rangle$ sont connus et où ϕ_i représente τ_ik_i.

Pour $V^K=V^{+2}$ générateur de SU_3, $\langle\phi\|V^{+2}\|\phi'\rangle = 0$ si $\alpha=\alpha'$. Les éléments de matrice réduits de l'opérateur V^{+2} entre les états de l'ensemble des représentations λ classant les opérateurs à 2 particules sont donnés par le tableau de résultats III.

Nous sommes en mesure maintenant de faire construire par le programme CLEGA1 les systèmes linéaires (6) et d'obtenir à l'aide de CLEGA2 les C.C.G. du type $\langle\lambda'\tau'k_3+\lambda_3\tau_3k_3|\alpha\lambda\tau 0\rangle$ portés au tableau de résultats II.

3°) Choix des C.C.G. et vérification des résultats.

Le calcul des éléments de matrice du générateur V^{+2} entre les états $|(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k\rangle$ à l'aide de la formule (7) est nécessaire pour vérifier les C.C.G. obtenus et pour les choisir de façon cohérente. En effet, les solutions dépendent d'un choix arbitraire de phase pour chaque système $(\lambda_1\times\lambda_2)\lambda k$ traité et en principe d'un choix arbitraire de solutions orthonormées pour les cas dégénérés. On s'impose alors les conditions suivantes :

a) Le calcul des éléments de matrice réduits du générateur V^{+2} pour une représentation λ donnée à l'aide des C.C.G. correspondant à la résolution des systèmes $(\lambda_1\times\lambda_2)\lambda k_1 \ldots (\lambda_1\times\lambda_2)\lambda k_n$, c'est-à-dire à l'aide des C.C.G. correspondant au traitement d'un ensemble $(\lambda_1\times\lambda_2)\lambda$ donné, doit redonner les mêmes résultats en valeur et en signe que ceux obtenus pour tout autre ensemble $(\lambda'_1\times\lambda'_2)\lambda$ déjà traité. Cette condition impose dans les cas non dégénérés une relation de phase entre les différents systèmes de λ donnée.

Si certains systèmes $(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k$ sont dégénérés et ont conduit à des déterminations de solutions arbitraires, cette condition est nécessaire mais non suffisante. On doit d'abord :

b) Imposer que V^{+3} , qui est un générateur de SU_3 soit diagonal

en λ . Les solutions arbitraires doivent donc assurer

$$\langle(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k\|V^{+2}\|(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha'\lambda'\tau'k'\rangle = 0 \quad \text{si} \quad \alpha \neq \alpha' \ .$$

c) Ensuite, la condition a) précédente imposée aux éléments de matrice de V^{+2}

$$\langle(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k\|V^{+2}\|(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda'\tau'k'\rangle = \langle(\lambda_1'\times\lambda_2')\alpha'\lambda\tau k\|V^{+2}\|(\lambda_1'\times\lambda_2')\alpha'\lambda\tau'k'\rangle$$

conduit à des choix compatibles de solutions arbitraires pour les différents cas traités $(\lambda_1\times\lambda_2)\alpha\lambda\tau k$ et $(\lambda_1'\times\lambda_2')\alpha'\lambda\tau'k$ et impose les relations de phase nécessaires.

La relation qui existe entre les éléments de matrice de V^{+2} pour λ donnée et la valeur propre $G(\lambda)$ de l'opérateur de Casimir peut être utile pour verifier les résultats obtenus.

On a $(\lambda\tau kq|G|\lambda\tau kq\rangle = G(\lambda) = (-1)^{k-q}\begin{pmatrix} k & 0 & k \\ -q & 0 & q \end{pmatrix}\langle\lambda\tau k\|G\|\lambda\tau k\rangle$

Soit $\langle\lambda\tau kq|G|\lambda\tau kq\rangle = G(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{[k]}}\langle\lambda\tau k\|G\|\lambda\tau k\rangle$

On a aussi $\langle\lambda\tau k\|G\|\lambda\tau k\rangle = \langle\lambda\tau k\|\frac{5}{6}[V^1.V^1+V^{+2}.V^{+2}]\|\lambda\tau k\rangle$

Soit $$\boxed{G(\lambda) = \frac{5}{6}\left[\frac{k(k+1)}{10} + \frac{1}{[k]}\sum_{k''}\langle\lambda\tau k\|V^{+2}\|\lambda\tau''k''\rangle^2\right]} \quad , \qquad (8)$$

relation facile à vérifier si on dispose de tous les éléments de matrice réduits de V^{+2} pour la représentation λ donnée, c'est-à-dire si les C.C.G. $\langle\lambda_1\tau_1k_1+\lambda_2\tau_2k_2|\alpha\lambda\tau k\rangle$ ont été calculés pour toutes les valeurs de k possibles.

En fait la formule (5) qui donne la forme des opérateurs classés, scalaires, à 3 particules montre que la valeur de k' maximale ,

intéressante pour notre problème, est égale à la valeur k_3 maximale, soit $k'=4$, et nous n'avons pas calculé des C.C.G. correspondant aux valeurs de k supérieures à 4 ; les tableaux de résultats III ne sont donc pas complets pour $\lambda = (33),(44),(25)...$ et la relation (8) ne peut être utilisée pour ces cas là (sauf pour $k \leqslant 2$) .

L'ensemble des C.C.G. ainsi déterminés permet la construction de tous les opérateurs scalaires à 3 particules définis par l'équation (5), opérateurs correspondant à l'ensemble des représentations données dans la table 1. La détermination, parmi ces opérateurs classés de départ, des combinaisons linéaires indépendantes hermitiques et symétriques formant l'ensemble complet que nous cherchons des opérateurs effectifs électrostatiques à 3 particules agissant dans $(d+s)^n$ fait l'objet de la seconde partie de ce chapitre mais, avant de l'aborder, nous allons parler des différents problèmes de dégénérescence rencontrés et des états $SU_3 \supset R_3$ choisis.

Les systèmes linéaires à résoudre sont en général dégénérés et les dégénérescences ont plusieurs origines possibles.

a) L'expression (1) de la valeur propre $G(\sigma_1\sigma_2)$ de l'opérateur de Casimir pour une représentation $(\sigma_1\sigma_2)$ quelconque de SU_3 et par conséquent la relation (4) qui détermine les systèmes linéaires, sont les mêmes pour 2 représentations conjuguées $(\sigma_1\sigma_2)$ et $(\sigma_2\sigma_1)$. Un même système linéaire $(\sigma_1\sigma_2)k$ correspond aux solutions

$$\langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | (\sigma_1\sigma_2)k \rangle \quad \text{et} \quad \langle \lambda_1\tau_1 k_1 + \lambda_2\tau_2 k_2 | (\sigma_2\sigma_1)k \rangle$$

et est donc au moins doublement dégénéré.

b) La relation (4) ne dépend pas non plus de la dégénérescence "externe" α ni de la dégénérescence "interne" τ. Donc, si une représentation λ apparaît α fois dans le produit de Kronecker $\lambda_1 \times \lambda_2$ et si on s'intéresse à une valeur de k τ fois dégénérée, la dégénérescence totale du système linéaire à résoudre est :

$\alpha \times \tau$ pour une représentation autoconjuguée $\lambda = (\sigma_i \sigma_i)$,

$2\alpha \times \tau$ pour une représentation quelconque $(\sigma_i \sigma_j)$

Nous avons déjà dit à propos du programme CLEGA2 qui résoud sous forme exacte $a\sqrt{b}/c$ les systèmes linéaires, que dans les cas p fois dégénérés p solutions arbitraires orthonormées sont déterminées. Ces solutions mélangent donc dégénérescence interne et externe et un problème important est de trouver suivant quels critères on peut combiner entre elles ces solutions de départ pour, d'une part, séparer les deux types de dégénérescence et, d'autre part, lever au mieux la dégénérescence interne. Ce dernier point rejoint le problème très général de la caractérisation complète des états $SU_3 \supset R_3$.

Plusieurs problèmes différents interviennent dans le choix des solutions et pour montrer comment ils s'introduisent nous parlons brièvement dans le prochain paragraphe de l'utilisation des propriétés de symétrie et dans le paragraphe suivant nous montrons comment la dégénérescence peut être en partie levée en imposant certaines propriétés d'hermiticité aux opérateurs couplés. Le problème général de la dégénérescence interne n'est pas résolu mais la détermination de ces solutions correspond à une diminution de l'arbitraire du choix des états de base $SU_3 \supset R_3$ et dans le dernier paragraphe nous comparons la base obtenue avec celles proposées par différents auteurs et notamment avec celle définie par Judd, Miller, Patera et Winternitz dans un article récent (1974).

TABLEAU I

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SU3>R3

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES SYMETRIQUES ET ANTISYMETRIQUES (*) DU TYPE (11)(11)

K=0	[(00) 0>	[(22) 0>
<(11)1 +(11)1 |	1(5)/4	-1(10)/4
<(11)2 +(11)2 |	-1(10)/4	-1(5)/4

K=1	[(11) 1>	[(11)1>(*)	[(03)1>(*)	[(30)1>(*)
<(11)1 +(11)1 |	0	-1(5)/6	-1(15)/6	-1(15)/6
<(11)1 +(11)2 |	1(2)/2	0	-1(1)/2	1(1)/2
<(11)2 +(11)1 |	1(2)/2	0	1(1)/2	-1(1)/2
<(11)2 +(11)2 |	0	1(30)/6	-1(3)/6	-1(3)/6

K=2	[(11) 2>	[(11)2'>(*)	[(22) 2>	[(22)2'>
<(11)1 +(11)1]	-1(30)/10	0	1(70)/10	0
<(11)1 +(11)2]	0	-1(2)/2	0	-1(2)/2
<(11)2 +(11)1]	0	-1(2)/2	0	1(2)/2
<(11)2 +(11)2]	-1(70)/10	0	-1(30)/10	0

K=3	[(03)3>(*)	[(30)3>(*)	[(22) 3>
<(11)1 +(11)2]	-1(1)/2	1(1)/2	1(2)/2
<(11)2 +(11)1]	1(1)/2	-1(1)/2	1(2)/2
<(11)2 +(11)2]	1(2)/2	1(2)/2	0

K=4	[(22) 4>
<(11)2 +(11)2]	1(1)/1

TABLEAU II

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN $SU_3 \supset R_3$

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE (11)(22)

K=0	[(22) 0>	[(22)'0>
<(11)2 +(22)2]	-1(1)/1	0
<(11)2 +(22)2']	0	-1(1)/1

K=1	[(11) 1>	[(03) 1>	[(30) 1>	[(14) 1>	[(41) 1>	[(33) 1>
<(11)1 +(22)0]	-1(5)/9	1(10)/9	1(10)/9	-1(14)/9	-1(14)/9	2(7)/9
<(11)1 +(22)2]	2(7)/9	1(14)/36	1(14)/36	-5(10)/36	-5(10)/36	-2(5)/9
<(11)1 +(22)2']	0	-1(30)/12	1(30)/12	1(42)/12	-1(42)/12	0
<(11)2 +(22)2]	0	-1(42)/12	1(42)/12	-1(30)/12	1(30)/12	0
<(11)2 +(22)2']	2(5)/9	-5(10)/36	-5(10)/36	-1(14)/36	-1(14)/36	2(7)/9
<(11)2 +(22)3]	-2(7)/9	-1(14)/9	-1(14)/9	-1(10)/9	-1(10)/9	-1(5)/9

K=2	[(11) 2>	[(22) 2>	[(22)2'>	[(22)'2>	[(22)'2'>	[(14) 2>
<(11)1 +(22)2]	0	0	-1(3)/4	-1(3)/4	0	1(5)/4
<(11)1 +(22)2']	2(3)/9	-1(3)/4	0	0	-1(3)/4	1(21)/36
<(11)1 +(22)3]	2(105)/45	2(105)/35	0	0	0	-1(15)/9
<(11)2 +(22)0]	1(5)/15	-1(5)/5	0	0	-1(5)/5	-1(35)/15
<(11)2 +(22)2]	2(5)/15	29(5)/140	0	0	-1(5)/4	5(35)/84
<(11)2 +(22)2']	0	0	-1(5)/4	-1(5)/4	0	-1(3)/4
<(11)2 +(22)3]	0	0	-1(2)/2	1(2)/2	0	0
<(11)2 +(22)4]	-2(30)/15	3(30)/70	0	0	-1(33)/10	-1(210)/105

K=2	[(41) 2>	[(33) 2>
<(11)1 +(22)2]	1(5)/4	0
<(11)1 +(22)2']	-1(21)/36	-2(1)/3
<(11)1 +(22)3]	1(15)/9	-1(35)/21
<(11)2 +(22)0]	1(35)/16	2(15)/15
<(11)2 +(22)2]	-5(35)/84	2(15)/21
<(11)2 +(22)2']	-1(3)/4	0
<(11)2 +(22)3]	0	0
<(11)2 +(22)4]	1(210)/105	-3(10)/35

K=3	[(03) 3>	[(30) 3>	[(22) 3>	[(22)3 >	[(14) 3>	[(41) 3>
<(11)1 +(22)2]	-1(14)/14	-1(14)/14	-2(3)/7	0	0	0
<(11)1 +(22)2']	1(60)/18	-1(30)/18	0	0	-1(2)/3	1(2)/3
<(11)1 +(22)3]	-1(15)/18	1(15)/18	0	-1(6)/4	-5(1)/12	5(1)/12
<(11)1 +(22)4]	-1(35)/14	-1(35)/14	3(30)/28	0	1(21)/12	1(21)/12
<(11)2 +(22)2]	-2(7)/21	2(7)/21	0	-1(70)/14	1(105)/42	-1(105)/42
<(11)2 +(22)2']	0	0	1(70)/14	0	-1(1)/2	-1(1)/2
<(11)2 +(22)3]	-1(1)/2	-1(1)/2	-1(42)/28	0	-1(15)/12	-1(15)/12
<(11)2 +(22)4]	-5(21)/42	5(21)/42	0	1(210)/28	-1(35)/28	1(35)/28

K=3	[(33) 3>	[(33)3'>
<(11)1 +(22)2]	1(30)/7	0
<(11)1 +(22)2']	0	-1(30)/9
<(11)1 +(22)3]	0	1(15)/9
<(11)1 +(22)4]	1(3)/21	0
<(11)2 +(22)2]	0	-5(7)/21
<(11)2 +(22)2']	1(7)/7	0
<(11)2 +(22)3]	-1(105)/21	0
<(11)2 +(22)4]	0	-1(21)/21

K=4	[(22) 4>	[(22)'4>	[(14) 4>	[(41) 4>	[(33) 4>	[(33)4'>
<(11)1 +(22)3]	-1(210)/28	0	-1(15)/12	1(15)/12	1(231)/21	0
<(11)1 +(22)4]	0	-1(10)/4	1(3)/12	1(3)/12	0	1(3)/3
<(11)2 +(22)2]	1(6)/14	0	5(21)/42	-5(21)/42	1(165)/21	0
<(11)2 +(22)2']	0	-1(5)/6	1(5)/6	1(5)/6	0	-1(5)/3
<(11)2 +(22)3]	0	-1(30)/12	-7(1)/12	-7(1)/12	0	-1(1)/3
<(11)2 +(22)4]	-5(22)/28	0	1(77)/28	-1(77)/28	-1(5)/7	0

TABLEAU III

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN $SU_3 \supset R_3$

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES SYMETRIQUES

K=0	[(00) 0>	[(22) 0>	[(22)'0>	[(06) 0>	[(60) 0>	[(44) 0>
<(22)0 +(22)0]	-1(3)/9	0	2(2)/5	4(21)/45	-4(21)/45	-1(70)/15
<(22)2 +(22)2]	-1(15)/9	1(14)/7	0	-5(105)/126	5(105)/126	-5(14)/42
<(22)2 +(22)2']	0	0	0	-1(1)/2	-1(1)/2	0
<(22)2'+(22)2]	0	0	0	-1(1)/2	-1(1)/2	0
<(22)2'+(22)2']	1(15)/9	0	-1(10)/5	1(105)/90	-1(105)/90	-1(14)/6
<(22)3 +(22)3]	1(21)/9	-1(10)/8	1(14)/8	-2(3)/9	2(3)/9	-1(10)/12
<(22)4 +(22)4]	-1(3)/3	-5(70)/56	-7(2)/40	-2(21)/105	2(21)/105	-3(70)/140

K=1	[(11) 1>	[(14) 1>	[(41) 1>	[(33) 1>
<(22)2 +(22)2]	0	0	0	0
<(22)2 +(22)2']	1(30)/18	-2(3)/9	-2(3)/9	-1(1)/3
<(22)2 +(22)3]	4(42)/63	-1(105)/126	-1(105)/126	2(35)/21
<(22)2' +(22)2]	-1(30)/18	2(3)/9	2(3)/9	1(1)/3
<(22)2' +(22)2']	0	0	0	0
<(22)2' +(22)3]	0	1(1)/2	-1(1)/2	0
<(22)3 +(22)2]	4(42)/63	-1(105)/126	-1(105)/126	2(35)/21
<(22)3 +(22)2']	0	1(1)/2	-1(1)/2	0
<(22)3 +(22)3]	0	0	0	0
<(22)3 +(22)4]	-1(105)/21	-1(42)/21	-1(42)/21	1(14)/14
<(22)4 +(22)3]	-1(105)/21	-1(42)/21	-1(42)/21	1(14)/14
<(22)4 +(22)4]	0	0	0	0

K=2	[(11) 2>	[(22) 2>	[(22)'2>	[(22)2'>	[(22)'2'>	[(14) 2>
<(22)0 +(22)2]	2(30)/45	1(70)/35	0	0	0	-2(30)/45
<(22)0 +(22)2']	0	0	0	0	1(2)/5	0
<(22)2 +(22)0]	2(30)/45	1(70)/35	0	0	0	-2(30)/45
<(22)2 +(22)2]	-29(30)/630	-39(70)/980	-5(2)/28	0	0	-5(30)/126
<(22)2 +(22)2']	0	0	0	1(70)/28	-1(2)/4	-1(14)/14
<(22)2 +(22)3]	0	0	0	3(7)/56	1(5)/8	1(35)/28
<(22)2 +(22)4]	-2(5)/35	51(105)/1960	-15(3)/56	0	0	3(5)/140
<(22)2'+(22)0]	0	0	0	0	1(2)/5	0
<(22)2'+(22)2]	0	0	0	1(70)/28	-1(2)/4	-1(14)/14
<(22)2'+(22)2']	-1(30)/18	-1(70)/28	1(2)/4	0	0	1(30)/18
<(22)2'+(22)3]	2(3)/9	3(7)/56	1(5)/8	0	0	1(3)/36
<(22)2'+(22)4]	0	0	0	-5(105)/168	-31(3)/120	5(21)/84
<(22)3 +(22)2]	0	0	0	-3(7)/56	-1(5)/8	-1(35)/28
<(22)3 +(22)2']	-2(3)/9	-3(7)/56	-1(5)/8	0	0	-1(3)/36
<(22)3 +(22)3]	-1(5)/15	2(105)/35	0	0	0	1(5)/6
<(22)3 +(22)4]	0	0	0	-5(21)/42	1(15)/30	-1(105)/42
<(22)4 +(22)2]	-2(5)/35	51(105)/1960	-15(3)/56	0	0	3(5)/140
<(22)4 +(22)2']	0	0	0	-5(105)/168	-31(3)/120	5(21)/84
<(22)4 +(22)3]	0	0	0	5(21)/42	-1(15)/30	1(105)/42
<(22)4 +(22)4]	1(165)/21	-1(385)/49	-1(11)/7	0	0	1(165)/42

k=2	[(41) 2>	[(33) 2>	[(06) 2>	[(60) 2>	[(44) 2>	[(44)2'>
<(22)0 +(22)2]	2(30)/45	-4(105)/315	-1(5)/15	1(5)/15	-1(55)/18	0
<(22)0 +(22)2']	0	0	1(21)/15	1(21)/15	0	-1(210)/30
<(22)2 +(22)0]	2(30)/45	-4(105)/315	-1(5)/15	1(5)/15	-1(55)/18	0
<(22)2 +(22)2]	5(30)/126	-23(105)/441	-1(5)/5	1(5)/6	5(66)/126	0
<(22)2 +(22)2']	-1(14)/14	0	-1(21)/42	-1(21)/42	0	-1(210)/42
<(22)2 +(22)3]	1(35)/28	0	-1(210)/42	-1(210)/42	0	-5(21)/84
<(22)2 +(22)4]	-3(5)/140	31(70)/735	-1(30)/30	1(30)/30	1(11)/84	0
<(22)2'+(22)0]	0	0	1(21)/15	1(21)/15	0	-1(210)/30
<(22)2'+(22)2]	-1(14)/14	0	-1(21)/42	-1(21)/42	0	-1(210)/42
<(22)2'+(22)2']	-1(30)/18	1(105)/63	-1(5)/6	1(5)/6	-1(55)/18	0
<(22)2'+(22)3]	-1(5)/35	1(42)/63	-1(2)/6	1(2)/6	1(165)/35	0
<(22)2'+(22)4]	5(21)/84	0	1(14)/210	1(14)/210	0	-17(35)/420
<(22)3 +(22)2]	-1(35)/28	0	1(210)/42	1(210)/42	0	5(21)/84
<(22)3 +(22)2']	1(3)/35	-1(42)/63	1(2)/6	-1(2)/6	-1(165)/35	0
<(22)3 +(22)3]	-1(5)/5	-1(70)/14	0	0	0	0
<(22)3 +(22)4]	-1(105)/42	0	-2(70)/105	-2(70)/105	0	-1(7)/21
<(22)4 +(22)2]	-3(5)/140	31(70)/735	-1(30)/30	1(30)/30	1(11)/84	0
<(22)4 +(22)2']	5(21)/84	0	1(14)/210	1(14)/210	0	-17(35)/420
<(22)4 +(22)3]	1(105)/42	0	2(70)/105	2(70)/105	0	1(7)/21
<(22)4 +(22)4]	-1(165)/42	-1(2310)/294	0	0	-2(3)/21	0

k=3	[(22) 3>	[(22)'3>	[(14) 3>	[(41) 3>	[(33) 3>	[(33)3'>
<(22)0 +(22)3]	1(70)/256	-1(2)/8	1(3)/6	1(3)/6	2(14)/21	0
<(22)2 +(22)2]	0	0	0	0	0	0
<(22)2 +(22)2']	-3(5)/256	-5(7)/256	1(42)/84	1(42)/84	8(1)/21	0
<(22)2 +(22)3]	-2(3)/7	0	1(70)/28	1(70)/28	-1(15)/14	0
<(22)2 +(22)4]	0	0	-1(30)/12	1(30)/12	0	-1(3)/6
<(22)2'+(22)2]	3(5)/256	5(7)/256	-1(42)/84	-1(42)/84	-8(1)/21	0
<(22)2'+(22)2']	0	0	0	0	0	0
<(22)2'+(22)3]	0	0	1(6)/12	-1(6)/12	0	-1(15)/6
<(22)2'+(22)4]	5(15)/42	-1(21)/42	5(14)/84	5(14)/84	-25(3)/126	0
<(22)3 +(22)0]	1(70)/256	-1(2)/8	1(3)/6	1(3)/6	2(14)/21	0
<(22)3 +(22)2]	-2(3)/7	0	1(70)/28	1(70)/28	-1(15)/14	0
<(22)3 +(22)2']	0	0	1(6)/12	-1(6)/12	0	-1(15)/6
<(22)3 +(22)3]	0	0	0	0	0	0
<(22)3 +(22)4]	1(165)/168	1(231)/24	1(154)/84	1(154)/84	2(33)/63	0
<(22)4 +(22)2]	0	0	1(30)/12	-1(30)/12	0	1(3)/6
<(22)4 +(22)2']	-5(15)/42	1(21)/42	-5(14)/84	-5(14)/84	25(3)/126	0
<(22)4 +(22)3]	1(165)/168	1(231)/24	1(154)/84	1(154)/84	2(33)/63	0
<(22)4 +(22)4]	0	0	0	0	0	0

K=3	[(44) 3>
<(22)0 +(22)3]	1(22)/12
<(22)2 +(22)2]	0
<(22)2 +(22)2']	-5(77)/84
<(22)2 +(22)3]	0
<(22)2 +(22)4]	0
<(22)2'+(22)2]	5(77)/84
<(22)2'+(22)2']	0
<(22)2'+(22)3]	0
<(22)2'+(22)4]	-1(231)/63
<(22)3 +(22)0]	1(22)/12
<(22)3 +(22)2]	0
<(22)3 +(22)2']	0
<(22)3 +(22)3]	0
<(22)3 +(22)4]	-1(21)/35
<(22)4 +(22)2]	0
<(22)4 +(22)2']	1(231)/63
<(22)4 +(22)3]	-1(21)/36
<(22)4 +(22)4]	0

K=4	[(22) 4>	[(22)'4>	[(14) 4>	[(41) 4>	[(33) 4>	[(33)4'>
<(22)0 +(22)4]	-5(70)/168	-7(2)/120	-1(15)/18	1(15)/18	2(154)/63	0
<(22)2 +(22)2]	17(21)/392	-5(15)/56	5(2)/28	-5(2)/28	2(1155)/147	0
<(22)2 +(22)2']	0	0	1(210)/63	1(210)/63	0	2(35)/63
<(22)2 +(22)3]	0	0	1(42)/252	1(42)/252	0	19(7)/126
<(22)2 +(22)4]	-5(77)/147	-1(55)/21	1(66)/252	-1(66)/252	-43(35)/882	0
<(22)2'+(22)2]	0	0	1(210)/63	1(210)/63	0	2(35)/63
<(22)2'+(22)2']	25(21)/504	31(15)/360	5(2)/36	-5(2)/36	-2(1155)/189	0
<(22)2'+(22)3]	5(105)/126	-1(3)/18	1(10)/36	-1(10)/36	5(231)/378	0
<(22)2'+(22)4]	0	0	-1(770)/84	-1(770)/84	0	-1(1155)/126
<(22)3 +(22)2]	0	0	-1(42)/252	-1(42)/252	0	-19(7)/126
<(22)3 +(22)2']	-5(105)/126	1(3)/18	-1(10)/36	1(10)/36	-5(231)/378	0
<(22)3 +(22)3]	-1(1155)/504	-7(33)/72	1(110)/36	-1(110)/36	-5(21)/189	0
<(22)3 +(22)4]	0	0	-1(154)/42	-1(154)/42	0	2(231)/63
<(22)4 +(22)0]	-5(70)/168	-7(2)/120	-1(15)/18	1(15)/18	2(154)/63	0
<(22)4 +(22)2]	-5(77)/147	-1(55)/21	1(66)/252	-1(66)/252	-43(35)/882	0
<(22)4 +(22)2']	0	0	-1(770)/84	-1(770)/84	0	-1(1155)/126
<(22)4 +(22)3]	0	0	1(154)/42	1(154)/42	0	-2(231)/63
<(22)4 +(22)4]	5(15015)/1176	-17(429)/840	-1(1430)/84	1(1430)/84	-5(273)/441	0

k=4	[(05) 4>	[(60) 4>	[(44) 4>	[(44)4'>	[(44)4''>
<(22)0 +(22)4]	-1(55)/45	1(55)/45	1(2145)/210	0	-47(2)/252
<(22)2 +(22)2]	0	0	5(286)/196	0	55(15)/588
<(22)2 +(22)2']	1(231)/63	1(231)/63	0	-5(154)/126	0
<(22)2 +(22)3]	1(1155)/126	1(1155)/126	0	1(770)/63	0
<(22)2 +(22)4]	1(15)/18	-1(15)/18	5(78)/147	0	-8(55)/441
<(22)2'+(22)2]	1(231)/63	1(231)/63	0	-5(154)/126	0
<(22)2'+(22)2']	-2(55)/45	2(55)/45	1(286)/28	0	-43(15)/756
<(22)2'+(22)3]	1(11)/18	-1(11)/18	0	0	0
<(22)2'+(22)4]	5(7)/42	5(7)/42	0	-1(42)/63	0
<(22)3 +(22)2]	-1(1155)/126	-1(1155)/126	0	-1(770)/63	0
<(22)3 +(22)2']	-1(11)/18	1(11)/18	0	0	0
<(22)3 +(22)3]	-7(1)/18	7(1)/18	-1(130)/28	0	0
<(22)3 +(22)4]	-1(35)/42	-1(35)/42	0	-1(210)/63	0
<(22)4 +(22)0]	-1(55)/45	1(55)/45	1(2145)/210	0	-47(2)/252
<(22)4 +(22)2]	1(15)/18	-1(15)/18	5(78)/147	0	-8(55)/441
<(22)4 +(22)2']	5(7)/42	5(7)/42	0	-1(42)/63	0
<(22)4 +(22)3]	1(35)/42	1(35)/42	0	1(210)/63	0
<(22)4 +(22)4]	-1(13)/30	1(13)/30	23(10)/980	0	13(23)/1764

TABLEAU III

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SU3>R3

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES ANTISYMETRIQUES

K=0	[(22) 0>
<(22)3 +(22)3]	0
<(22)2 +(22)2]	0
<(22)2 +(22)2']	1(2)/2
<(22)2'+(22)2]	-1(2)/2
<(22)2'+(22)2']	0
<(22)3 +(22)3]	0
<(22)4 +(22)4]	0

k=1	[(11) 1>	[(33) 1>	[(30) 1>	[(14) 1>	[(41) 1>	[(33) 1>
<(22)2 +(22)2]	-1(30)/18	4(42)/63	-4(42)/63	-1(210)/252	1(210)/252	-1(105)/63
<(22)2 +(22)2']	0	0	0	1(2)/4	1(2)/4	0
<(22)2 +(22)3]	0	1(14)/14	1(14)/14	-1(70)/28	-1(70)/28	0
<(22)2'+(22)2]	0	0	0	1(2)/4	1(2)/4	0
<(22)2'+(22)2']	1(30)/18	0	0	1(210)/36	-1(210)/36	1(105)/15
<(22)2'+(22)3]	0	-1(30)/18	1(30)/18	1(6)/12	-1(6)/12	-2(3)/9
<(22)3 +(22)2]	0	-1(14)/14	-1(14)/14	1(70)/28	1(70)/28	0
<(22)3 +(22)2']	0	1(30)/15	-1(30)/18	-1(6)/12	1(6)/12	2(3)/9
<(22)3 +(22)3]	1(21)/9	-1(15)/18	1(15)/18	-5(3)/18	5(3)/18	1(6)/18
<(22)3 +(22)4]	0	-1(35)/14	-1(35)/14	-1(7)/14	-1(7)/14	0
<(22)4 +(22)3]	0	1(35)/14	1(35)/14	1(7)/14	1(7)/14	0
<(22)4 +(22)4]	-1(5)/3	-5(7)/42	5(7)/42	-1(35)/42	1(70)/42	11(70)/210

k=1	[(25) 1>	[(52) 1>
<(22)2 +(22)2]	-1(210)/25	1(210)/25
<(22)2 +(22)2']	-1(2)/4	-1(2)/4
<(22)2 +(22)3]	-1(70)/28	-1(70)/28
<(22)2'+(22)2]	-1(2)/4	-1(2)/4
<(22)2'+(22)2']	-1(210)/60	1(210)/60
<(22)2'+(22)3]	-1(6)/12	1(6)/12
<(22)3 +(22)2]	1(70)/28	1(70)/28
<(22)3 +(22)2']	1(6)/12	-1(6)/12
<(22)3 +(22)3]	-1(3)/6	1(3)/6
<(22)3 +(22)4]	-1(7)/14	-1(7)/14
<(22)4 +(22)3]	1(7)/14	1(7)/14
<(22)4 +(22)4]	-1(35)/70	1(35)/70

k=2	[(11) 2>	[(22) 2>	[(22)2'>	[(14) 2>	[(41) 2>	[(33) 2>
<(22)0 +(22)2]	0	0	-1(10)/10	-1(5)/10	1(5)/10	0
<(22)0 +(22)2']	-2(30)/45	-1(10)/10	0	-1(21)/18	-1(21)/18	-4(1)/15
<(22)2 +(22)0]	0	0	1(10)/10	1(5)/10	-1(5)/10	0
<(22)2 +(22)2]	0	0	0	0	0	0
<(22)2 +(22)2']	-1(30)/18	0	0	-1(21)/63	-1(21)/63	-1(1)/3
<(22)2 +(22)3]	-2(3)/9	1(1)/14	0	13(210)/504	13(210)/504	-1(10)/21
<(22)2 +(22)4]	0	0	1(15)/10	-3(30)/40	3(30)/40	0
<(22)2'+(22)0]	2(30)/45	1(10)/10	0	1(21)/18	1(21)/18	4(1)/15
<(22)2'+(22)2]	1(30)/18	0	0	1(21)/63	1(21)/63	1(1)/3
<(22)2'+(22)2']	0	0	0	0	0	0
<(22)2'+(22)3]	0	0	-1(1)/2	-1(2)/8	1(2)/8	0
<(22)2'+(22)4]	2(5)/15	1(15)/10	0	-1(14)/168	-1(14)/168	-1(6)/5
<(22)3 +(22)2]	-2(3)/9	1(1)/14	0	13(210)/504	13(210)/504	-1(10)/21
<(22)3 +(22)2']	0	0	-1(1)/2	-1(2)/8	1(2)/8	0
<(22)3 +(22)3]	0	0	0	0	0	0
<(22)3 +(22)4]	1(1)/3	-2(3)/7	0	1(70)/42	1(70)/42	-3(30)/70
<(22)4 +(22)2]	0	0	-1(15)/10	3(30)/40	-3(30)/40	0
<(22)4 +(22)2']	-2(5)/15	-1(15)/10	0	1(14)/168	1(14)/168	1(6)/5
<(22)4 +(22)3]	1(1)/3	-2(3)/7	0	1(70)/42	1(70)/42	-3(30)/70
<(22)4 +(22)4]	0	0	0	0	0	0

K=2	[(25) 2>	[(52) 2>
<(22)0 +(22)2]	1(15)/10	-1(15)/10
<(22)0 +(22)2']	1(7)/10	1(7)/10
<(22)2 +(22)0]	-1(15)/10	1(15)/10
<(22)2 +(22)2]	0	0
<(22)2 +(22)2']	-1(7)/7	-1(7)/7
<(22)2 +(22)3]	1(70)/56	1(70)/56
<(22)2 +(22)4]	-1(10)/40	1(10)/40
<(22)2'+(22)0]	-1(7)/10	-1(7)/10
<(22)2'+(22)2]	1(7)/7	1(7)/7
<(22)2'+(22)2']	0	0
<(22)2'+(22)3]	-1(6)/8	1(6)/8
<(22)2'+(22)4]	13(42)/840	1$\bar{3}$(42)/840
<(22)3 +(22)2]	1(70)/56	1(70)/56
<(22)3 +(22)2']	-1(6)/8	1(6)/8
<(22)3 +(22)3]	0	0
<(22)3 +(22)4]	-1(210)/210	-1(210)/210
<(22)4 +(22)2]	1(10)/40	-1(10)/40
<(22)4 +(22)2']	-13(42)/840	-13(42)/840
<(22)4 +(22)3]	-1(210)/210	-1(210)/210
<(22)4 +(22)4]	0	0

K=3	[(03) 3>	[(30) 3>	[(22) 3>	[(14) 3>	[(41) 3>	[(33) 3>
<(22)0 +(22)3]	-1(210)/63	-1(210)/63	0	1(2)/12	1(2)/12	0
<(22)2 +(22)2]	-2(7)/49	2(7)/49	-1(35)/98	3(15)/28	-3(15)/28	2(105)/49
<(22)2 +(22)2']	5(15)/63	5(15)/63	0	1(7)/21	1(7)/21	0
<(22)2 +(22)3]	1(1)/42	1(1)/42	0	-1(105)/84	-1(105)/84	0
<(22)2 +(22)4]	-5(21)/98	5(21)/98	2(105)/49	-1(5)/28	1(5)/28	1(35)/98
<(22)2'+(22)2]	5(15)/63	5(15)/63	0	1(7)/21	1(7)/21	0
<(22)2'+(22)2']	0	0	-1(35)/14	1(15)/12	-1(15)/12	2(105)/105
<(22)2'+(22)3]	1(105)/42	-1(105)/42	0	1(1)/12	-1(1)/12	-1(7)/6
<(22)2'+(22)4]	-5(5)/42	-5(5)/42	0	5(21)/84	5(21)/84	0
<(22)3 +(22)3]	1(210)/63	1(210)/63	0	-1(2)/12	-1(2)/12	0
<(22)3 +(22)2]	-1(1)/42	-1(1)/42	0	1(105)/84	1(105)/84	0
<(22)3 +(22)2']	-1(105)/42	1(105)/42	0	-1(1)/12	1(1)/12	1(7)/6
<(22)3 +(22)3]	-1(105)/42	1(105)/42	1(21)/14	5(1)/12	-5(1)/12	-4(7)/21
<(22)3 +(22)4]	-1(55)/42	-1(55)/42	0	-1(231)/42	-1(231)/42	0
<(22)4 +(22)2]	-5(21)/98	5(21)/98	2(105)/49	-1(5)/28	1(5)/28	1(35)/98
<(22)4 +(22)2']	-5(5)/42	-5(5)/42	0	5(21)/84	5(21)/84	0
<(22)4 +(22)3]	1(55)/42	1(55)/42	0	1(231)/42	1(231)/42	0
<(22)4 +(22)4]	5(77)/98	-5(77)/98	3(385)/98	1(165)/84	-1(165)/84	3(1155)/735

K=3	[(33)3'>	[(25) 3>	[(25)3'>	[(52) 3>	[(52)3'>
<(22)0 +(22)3]	2(30)/45	-1(10)/40	-1(462)/55	-1(10)/40	-1(462)/55
<(22)2 +(22)2]	0	-5(3)/56	9(385)/392	5(3)/56	-9(385)/392
<(22)2 +(22)2']	-2(105)/63	-1(35)/28	-1(33)/28	-1(35)/28	-1(33)/28
<(22)2 +(22)3]	5(7)/42	-5(21)/56	1(55)/56	-5(21)/56	1(55)/56
<(22)2 +(22)4]	0	-17(1)/56	-1(1155)/392	17(1)/56	1(1155)/392
<(22)2'+(22)2]	-2(105)/63	-1(35)/28	-1(33)/28	-1(35)/28	-1(33)/28
<(22)2'+(22)2']	0	-1(3)/8	-1(385)/40	1(3)/8	1(385)/40
<(22)2'+(22)3]	0	-1(5)/8	1(231)/168	1(5)/8	-1(231)/168
<(22)2'+(22)4]	-11(35)/210	-13(105)/840	3(11)/56	-13(105)/840	3(11)/56
<(22)3 +(22)0]	-2(30)/45	1(10)/40	1(462)/55	1(10)/40	1(462)/55
<(22)3 +(22)2]	-5(7)/42	5(21)/56	-1(55)/56	5(21)/56	-1(55)/56
<(22)3 +(22)2']	0	1(5)/8	-1(231)/168	-1(5)/8	1(231)/168
<(22)3 +(22)3]	0	1(5)/8	-1(231)/168	-1(5)/8	1(231)/168
<(22)3 +(22)4]	-2(385)/105	-1(1155)/420	-3(1)/28	-1(1155)/420	-3(1)/28
<(22)4 +(22)2]	0	-17(1)/56	-1(1155)/392	17(1)/56	1(1155)/392
<(22)4 +(22)2']	-11(35)/210	-13(105)/840	3(11)/56	-13(105)/840	3(11)/56
<(22)4 +(22)3]	2(385)/105	1(1155)/420	3(1)/28	1(1155)/420	3(1)/28
<(22)4 +(22)4]	0	1(33)/56	-43(35)/1960	-1(33)/56	43(35)/1960

K=4	[(22) 4>	[(14) 4>	[(41) 4>	[(33) 4>	[(33)4'>	[(25) 4>
<(22)0 +(22)4]	0	1(10)/12	-1(10)/12	0	2(10)/15	1(330)/60
<(22)2 +(22)2]	0	0	0	0	0	0
<(22)2 +(22)2']	1(3)/5	-1(35)/28	-1(35)/28	0	0	-1(1155)/84
<(22)2 +(22)3]	-2(15)/21	1(7)/28	1(7)/28	1(55)/14	0	-1(231)/84
<(22)2 +(22)4]	0	-1(11)/12	1(11)/12	0	1(11)/6	-1(3)/12
<(22)2'+(22)2]	-1(3)/5	1(35)/28	1(35)/28	0	0	1(1155)/84
<(22)2'+(22)2']	0	0	0	0	0	0
<(22)2'+(22)3]	0	-1(15)/12	1(15)/12	0	-1(15)/30	1(55)/20
<(22)2'+(22)4]	0	1(1155)/84	1(1155)/84	-1(3)/6	0	-1(35)/28
<(22)3 +(22)2]	-2(15)/21	1(7)/28	1(7)/28	1(55)/14	0	-1(231)/84
<(22)3 +(22)2']	0	-1(15)/12	1(15)/12	0	-1(15)/30	1(55)/20
<(22)3 +(22)3]	0	0	0	0	0	0
<(22)3 +(22)4]	-1(55)/14	-1(231)/84	-1(231)/84	-2(15)/21	0	-1(7)/28
<(22)4 +(22)0]	0	-1(10)/12	1(10)/12	0	-2(10)/15	-1(330)/60
<(22)4 +(22)2]	0	1(11)/12	-1(11)/12	0	-1(11)/6	1(3)/12
<(22)4 +(22)2']	0	-1(1155)/84	-1(1155)/84	1(3)/6	0	1(35)/28
<(22)4 +(22)3]	-1(55)/14	-1(231)/84	-1(231)/84	-2(15)/21		-1(7)/28
<(22)4 +(22)4]	0	0	0	0	0	0

K=4	[(52) 4>
<(22)0 +(22)4]	-1(330)/60
<(22)2 +(22)2]	0
<(22)2 +(22)2']	-1(1155)/84
<(22)2 +(22)3]	-1(231)/84
<(22)2 +(22)4]	1(3)/12
<(22)2'+(22)2]	1(1155)/84
<(22)2'+(22)2']	0
<(22)2'+(22)3]	-1(55)/20
<(22)2'+(22)4]	-1(35)/28
<(22)3 +(22)2]	-1(231)/84
<(22)3 +(22)2']	-1(55)/20
<(22)3 +(22)3]	0
<(22)3 +(22)4]	-1(7)/28
<(22)4 +(22)0]	1(330)/60
<(22)4 +(22)2]	-1(3)/12
<(22)4 +(22)2']	1(35)/28
<(22)4 +(22)3]	-1(7)/28
<(22)4 +(22)4]	0

$\langle (\sigma_1\sigma_2)\, \alpha k \,\|V^{+2}\|\, (\sigma_1\sigma_2)\, \alpha' k' \rangle$

$(\sigma_1\sigma_2) \equiv (22), (11), (03), (30)$
$(14), (41)$

V^{+2}	(22)S	(22)D	(22)D'	(22)F	(22)G
(22)S	0	0	$-4\sqrt{5}/5$	0	0
(22)D	0	0	$-\sqrt{5}$	$-2\sqrt{2}$	0
(22)D'	$-4\sqrt{5}/5$	$-\sqrt{5}$	0	0	$-2\sqrt{30}/5$
(22)F	0	$2\sqrt{2}$	0	0	$-\sqrt{6}$
(22)G	0	0	$-2\sqrt{30}/5$	$\sqrt{6}$	0

V^{+2}	(11)P	(11)D
(11)P	0	$-\sqrt{3}$
(11)D	$\sqrt{3}$	0

V^{+2}	(03)P	(03)F
(03)P	9/5	$-2\sqrt{21}/5$
(03)F	$-2\sqrt{21}/5$	$3\sqrt{14}/5$

V^{+2}	(30)P	(30)F
(30)P	$-9/5$	$2\sqrt{21}/5$
(30)F	$2\sqrt{21}/5$	$-3\sqrt{14}/5$

V^{+2}	(14)P	(14)D	(14)F	(14)G	(41)P	(41)D	(41)F	(41)G
(14)P	9/5	$-2\sqrt{30}/5$	$-12/5$	0				
D	$2\sqrt{30}/5$	$-3\sqrt{21}/7$	$6\sqrt{5}/5$	$6\sqrt{7}/7$				
F	$-12/5$	$-6\sqrt{5}/5$	$-2\sqrt{14}/5$	$\sqrt{30}/5$			0	
G	0	$6\sqrt{7}/7$	$-\sqrt{30}/5$	$-6\sqrt{462}/35$				
(41)P					$-9/5$	$2\sqrt{30}/5$	$12/5$	0
D					$-2\sqrt{30}/5$	$3\sqrt{21}/7$	$-6\sqrt{5}/5$	$-6\sqrt{7}/7$
F			0		$12/5$	$6\sqrt{5}/5$	$2\sqrt{14}/5$	$-\sqrt{30}/5$
G					0	$-6\sqrt{7}/7$	$\sqrt{30}/5$	$6\sqrt{462}/35$

TABLEAU IV

$\langle (\sigma_1\sigma_2)\, \alpha k \,\|\, V^{t2} \,\|\, (\sigma_1\sigma_2)\, \alpha' k' \rangle$ $\qquad$ $(\sigma_1\sigma_2) \equiv (06)\ (60)\ (44)$

V^{t2}	$(06)S$	$(06)D$	$(06')G$ ...	$(60)S$	$(60)D$	$(60)G$ ...
$(06)S$	0	$-6\sqrt{5}/5$	0			
D	$-6\sqrt{5}/5$	$5\sqrt{21}/7$	$4\sqrt{1155}/35$		0	
G	0	$4\sqrt{1155}/35$	$15\sqrt{462}/77$			
$(60)S$				0	$6\sqrt{5}/5$	0
D		0		$6\sqrt{5}/5$	$-5\sqrt{21}/7$	$-4\sqrt{1155}/35$
G				0	$-4\sqrt{1155}/35$	$-15\sqrt{462}/77$

V^{t2}	$(44)S$	$(44)D$	$(44)D'$	$(44)F$	$(44)G$	$(44)G''$	$(44)G'$ ...
$(44)S$	0	0	$-4\sqrt{15}/5$	0	0	0	0
D	0	0	$-3\sqrt{77}/7$	$2\sqrt{6}/1$	0	0	$-4\sqrt{21}/7$
D'	$-4\sqrt{15}/5$	$-3\sqrt{77}/7$	0	0	$8\sqrt{15015}/245$	$-30\sqrt{14}/49$	0
F	0	$-2\sqrt{6}$	0	0	$-6\sqrt{65}/35$	$19\sqrt{66}/35$	0
G	0	0	$8\sqrt{15015}/245$	$6\sqrt{65}/35$	0	0	$27\sqrt{10010}/539$
G''	0	0	$-30\sqrt{14}/49$	$-19\sqrt{66}/35$	0	0	$174\sqrt{21}/245$
G'	0	$-4\sqrt{21}/7$	0	0	$27\sqrt{10010}/539$	$174\sqrt{21}/245$	0

TABLEAU IV suite 1

$\langle (\sigma_1\sigma_2)\tau k \| V^{t2} \| (\sigma_1\sigma_2)\tau' k' \rangle$ $\quad (\sigma_1\sigma_2) \equiv (33), (25), (52)$

V^{t2}	(33)P	(33)D	(33)F	(33)F'	(33)G	(33)G'
(33)P	0	$-3\sqrt{35}/5$	0	$2\sqrt{30}/5$	0	0
D	$3\sqrt{35}/5$	0	$2\sqrt{15}/5$	0	0	$2\sqrt{3}$
F	0	$-2\sqrt{15}/5$	0	$7\sqrt{30}/10$	$-\sqrt{66}/2$	0
F'	$2\sqrt{30}/5$	0	$7\sqrt{30}/10$	0	0	$-2\sqrt{2}/10$
G	0	0	$\sqrt{66}/2$	0	0	$3\sqrt{30}/10$
G'	0	$2\sqrt{3}$	0	$2\sqrt{2}/10$	$3\sqrt{30}/10$	0

V^{t2}	(25)P	(25)D	(25)F	(25)F'	(25)G	(52)P	(52)D	(52)F	(52)F'	(25)G
(25)P	3	$-2\sqrt{10}/5$	$-8\sqrt{5}/5$	0	0					
D	$2\sqrt{10}/5$	$-5\sqrt{21}/7$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{385}/5$	$-2\sqrt{77}/7$					
F	$-8\sqrt{5}/5$	$-\sqrt{3}$	$3\sqrt{14}/4$	$-7\sqrt{330}/60$	$-\sqrt{22}/10$			0		
F'	0	$-\sqrt{385}/5$	$-7\sqrt{330}/60$	$\sqrt{14}/4$	$3\sqrt{210}/10$					
G	0	$-2\sqrt{77}/7$	$\sqrt{22}/10$	$-3\sqrt{210}/10$	$6\sqrt{462}/77$					
P						-3	$-2\sqrt{10}/5$	$8\sqrt{5}/5$	0	0
D						$-2\sqrt{10}/5$	$5\sqrt{21}/7$	$-\sqrt{3}$	$-\sqrt{385}/5$	$2\sqrt{77}/7$
F						$8\sqrt{5}/5$	$\sqrt{3}$	$-3\sqrt{14}/4$	$7\sqrt{330}/60$	$\sqrt{22}/10$
F'			0			0	$\sqrt{385}/5$	$7\sqrt{330}/60$	$-\sqrt{14}/4$	$-3\sqrt{210}/10$
G						0	$2\sqrt{77}/7$	$-1\sqrt{22}/10$	$3\sqrt{210}/10$	$-6\sqrt{462}/77$

TABLEAU III suite 2

	$\|(22)0\rangle$	$\|(06)0\rangle$
$\langle(14)1 + (11)1\|$	$-\sqrt{10}/5$	$-\sqrt{15}/5$
$\langle(14)2 + (11)2\|$	$-\sqrt{15}/5$	$+\sqrt{10}/5$

	$\|(22)0\rangle$	$\|(60)0\rangle$
$\langle(41)1 + (11)1\|$	$-\sqrt{10}/5$	$-\sqrt{15}/5$
$\langle(41)2 + (11)2\|$	$+\sqrt{15}/5$	$-\sqrt{10}/5$

	$\|(22)0\rangle$	$\|(44)0\rangle$
$\langle(33)1 + (11)1$	$\sqrt{7}/4$	$-3/4$
$\langle(33)2 + (11)2$	$-3/4$	$-\sqrt{7}/4$

	$\|(06)0\rangle$	$\|(44)0\rangle$
$\langle(25)1 + (11)1$	$\sqrt{3}/3$	$-\sqrt{6}/3$
$\langle(25)2 + (11)2$	$-\sqrt{6}/3$	$-\sqrt{3}/3$

	$\|(60)0\rangle$	$\|(44)0\rangle$
$\langle(52)1 + (11)1\|$	$-\sqrt{3}/3$	$\sqrt{6}/3$
$\langle(52)2 + (11)2\|$	$-\sqrt{6}/3$	$-\sqrt{3}/3$

C.C.G. $SU3 \supset R3$ du type $(\lambda_1 \times 11) \alpha \lambda 2 0$, $\lambda_1 = (14), (41), (33), (25), (52)$

TABLEAU V (1)

	$\|(22)0\rangle$	$\|(22)'0\rangle$	$\|(06+60)0\rangle$	$\|(06-60)0\rangle$	$\|(44)0\rangle$	$\|(44)'0\rangle$
$\langle(33)2 + (22)2\|$	$\sqrt{7}/14$	0	$-2\sqrt{7}/7$	0	$\sqrt{77}/14$	0
$\langle(33)2 + (22)2'\|$	0	$-\sqrt{15}/10$	0	$-2\sqrt{15}/15$	0	$\sqrt{21}/6$
$\langle(33)3 + (22)3\|$	$\sqrt{6}/4$	0	$-\sqrt{6}/6$	0	$-\sqrt{66}/12$	0
$\langle(33)3' + (22)3\|$	0	$\sqrt{70}/20$	0	$-\sqrt{70}/10$	0	$-\sqrt{2}/4$
$\langle(33)4 + (22)4\|$	$-\sqrt{462}/28$	0	$-\sqrt{462}/42$	0	$-5\sqrt{42}/84$	0
$\langle(33)4' + (22)4\|$	0	$-3\sqrt{30}/20$	0	$-\sqrt{30}/30$	0	$-\sqrt{42}/12$

C.C.G. $SU_3 \supset R_3$ du type $(\lambda_1 \times 22) \alpha \lambda 2 0$, $\lambda_1 = (33)$

	$\|(66)0>$	$\|(22)0>$	$\|(06+60)0>$	$\|(06-60)0>$	$\|(44)0>$	$\|(44)''0>$	$\|(44)'0>$	$\|(28+82)0>$	$\|(28-82)0>$
$<(44)0+(22)0\|$	$-\sqrt{143}/25$	$-\sqrt{42}/25$	$4\sqrt{6}/25$	0	0	$2\sqrt{70}/35$	0	$8\sqrt{154}/175$	0
$<(44)2+(22)2\|$	$-\sqrt{273}/35$	$-\sqrt{22}/10$	$-1\sqrt{154}/70$	0	$-\sqrt{14}/7$	0	0	$-1\sqrt{6}/5$	0
$<(44)2+(22)2'\|$	0	0	0	$1\sqrt{330}/30$	0	0	$-\sqrt{210}/42$	0	$-3\sqrt{70}/35$
$<(44)2'+(22)2\|$	0	0	0	$-1\sqrt{42}/14$	0	0	$\sqrt{66}/14$	0	$-\sqrt{22}/7$
$<(44)2'+(22)2'\|$	$-\sqrt{2145}/75$	$3\sqrt{70}/50$	$-7\sqrt{10}/50$	0	0	$-\sqrt{42}/21$	0	$\sqrt{2310}/175$	0
$<(44)3+(22)3\|$	$\sqrt{65}/25$	$-1\sqrt{2310}/100$	$-2\sqrt{330}/75$	0	$-\sqrt{30}/24$	$\sqrt{154}/56$	0	$12\sqrt{70}/175$	0
$<(44)4+(22)4\|$	$103\sqrt{42}/3675$	$9\sqrt{143}/350$	$-18\sqrt{1001}/1225$	0	$-5\sqrt{91}/196$	$\sqrt{2145}/60$	0	$-\sqrt{39}/175$	0
$<(44)4'+(22)4\|$	0	0	0	$-2\sqrt{1155}/105$	0	0	$-4\sqrt{15}/21$	0	$-3\sqrt{5}/35$
$<(44)4''+(22)4\|$	$-3\sqrt{5005}/1225$	$-43\sqrt{30}/700$	$-104\sqrt{210}/3675$	0	$19\sqrt{2310}/1176$	$\sqrt{2}/8$	0	$-3\sqrt{110}/175$	0

C.C.G $SU_3 \supset R_3$ du type $(\lambda_1 \times 22) \alpha \lambda 20$ $\lambda_1 \equiv (44)$

TABLEAU V (2)

	$\|(22)0>$	$\|(06)0>$	$\|(44)0>$	$\|(28)0>$
$<(06)0+(22)0\|$	$2/5$	$-\sqrt{3}/5$	$-2\sqrt{105}/35$	$\sqrt{462}/35$
$<(06)2+(22)2\|$	$-\sqrt{21}/14$	$\sqrt{7}/7$	$-5\sqrt{5}/14$	$-\sqrt{22}/14$
$<(06)2+(22)2'\|$	$-3\sqrt{5}/10$	$\sqrt{15}/15$	$\sqrt{21}/42$	$\sqrt{2310}/70$
$<(06)4+(22)4\|$	$-3\sqrt{154}/70$	$-4\sqrt{462}/105$	$-\sqrt{330}/210$	$-4\sqrt{3}/35$
		$\|(60)0>$		$\|(22)0>$
$<(60)0+(22)0\|$	$2/5$	$-\sqrt{3}/5$	$-2\sqrt{105}/35$	$\sqrt{462}/35$
$<(60)2+(22)2\|$	$-\sqrt{21}/14$	$\sqrt{7}/7$	$-5\sqrt{5}/14$	$-\sqrt{22}/14$
$<(60)2+(22)2'\|$	$3\sqrt{5}/10$	$-\sqrt{15}/15$	$-\sqrt{21}/42$	$-\sqrt{2310}/70$
$<(60)4+(22)4\|$	$-3\sqrt{154}/70$	$-4\sqrt{462}/105$	$-\sqrt{330}/210$	$-4\sqrt{3}/35$

	$\|(22)0>$	$\|(22)'0>$	$\|(06)0>$	$\|(44)0>$
$<(14)2+(22)2\|$	$-2\sqrt{70}/35$	$3\sqrt{105}/70$	$-1\sqrt{210}/70$	$\sqrt{105}/14$
$<(14)2+(22)2'\|$	0	$-1/2$	$\sqrt{2}/2$	$1/2$
$<(14)3+(22)3\|$	$-3\sqrt{5}/10$	$\sqrt{30}/20$	$2\sqrt{15}/15$	$-\sqrt{30}/12$
$<(14)4+(22)4\|$	$-3\sqrt{7}/14$	$-3\sqrt{42}/28$	$-2\sqrt{21}/21$	$-\sqrt{42}/84$
			$\|(60)0>$	
$<(41)2+(22)2\|$	$2\sqrt{70}/35$	$-3\sqrt{105}/70$	$-1\sqrt{210}/70$	$\sqrt{105}/14$
$<(41)2+(22)2'\|$	0	$-1/2$	$-\sqrt{2}/2$	$-1/2$
$<(41)3+(22)3\|$	$-3\sqrt{5}/10$	$\sqrt{30}/20$	$-2\sqrt{15}/15$	$\sqrt{30}/12$
$<(41)4+(22)4\|$	$3\sqrt{7}/14$	$3\sqrt{42}/28$	$-2\sqrt{21}/21$	$-\sqrt{42}/84$

C.C.G $SU_3 \supset R_3$ du type $(\lambda_1 \times 22)\alpha\lambda 20$, $\lambda_1 = (06), (60), (14), (41)$

TABLEAU V (3)

	$\|(22)0>$	$\|(06)0>$	$\|(28)0>$	$\|(44)0>$	$\|(44)'0>$
$<(25)2+(22)2\|$	$-1/2$	$\sqrt{42}/14$	$-\sqrt{22}/7$	0	$-\sqrt{17}/14$
$<(25)2+(22)2'\|$	$\sqrt{105}/30$	$-\sqrt{10}/30$	$-\sqrt{2310}/105$	$-2\sqrt{374}/51$	$5\sqrt{1785}/714$
$<(25)3+(22)3\|$	$-\sqrt{210}/120$	$4\sqrt{5}/15$	$\sqrt{1155}/210$	$\sqrt{187}/204$	$37\sqrt{3570}/2856$
$<(25)3'+(22)3\|$	$-\sqrt{22}/8$	0	$1/2$	$-\sqrt{1785}/68$	$-\sqrt{374}/136$
$<(25)4+(22)4\|$	$-\sqrt{110}/20$	$-2\sqrt{1155}/105$	$-4\sqrt{5}/35$	$\sqrt{357}/102$	$5\sqrt{1870}/476$
		$\underline{\|(60)0>}$	$\underline{\|(82)0>}$		
$<(52)2+(22)2\|$	$-1/2$	$\sqrt{42}/14$	$-\sqrt{22}/7$	0	$-\sqrt{17}/14$
$<(52)2+(22)2'\|$	$-\sqrt{105}/30$	$\sqrt{10}/30$	$\sqrt{2310}/105$	$2\sqrt{374}/51$	$-5\sqrt{1785}/714$
$<(52)3+(22)3\|$	$\sqrt{210}/120$	$-4\sqrt{5}/15$	$-\sqrt{1155}/210$	$-\sqrt{187}/204$	$-37\sqrt{3570}/2856$
$<(52)3'+(22)3\|$	$\sqrt{22}/8$	0	$-1/2$	$\sqrt{1785}/68$	$\sqrt{374}/136$
$<(52)4+(22)4\|$	$-\sqrt{110}/20$	$-2\sqrt{1155}/105$	$-4\sqrt{5}/35$	$\sqrt{357}/102$	$5\sqrt{1870}/476$

C.C.G $SU_3 \supset R_3$ du type $(\lambda_1 \times 22) \alpha \lambda \tau 0$ $\quad \lambda_1 \equiv (25)(52)$

TABLEAU V (4)

II. Propriétés de symétrie et dégénérescence externe.

On sait que le carré de Kronecker $(u)\times(u)$ s'écrit en fonction des pléthysmes

$$(u)(u) = u\otimes\{2\} + u\otimes\{1^2\}$$
$$= \Sigma\, \lambda_{\text{symétriques}} + \Sigma\, \lambda_{\text{antisymétriques}} .$$

Ainsi $(11)(11) = (00)+(22)+2(11)+(03)+(30)$ s'écrit

$$(11)(11) = (11)\otimes\{2\}+(11)\otimes\{1^2\} \quad \text{avec respectivement}$$
$$(11)\otimes\{2\} = (00)_s,(22)_s,(11)_s$$
$$(11)\otimes\{1^2\} = (11)_a+(03)_a+(30)_a .$$

On voit que si on sait imposer au système à résoudre $[(11)(11)]\alpha(11)\tau k$ une condition différenciant $(11)_s$ et $(11)_a$ la dégénérescence externe 2(11) est levée. On montre au chapitre III qu'on peut écrire, lorsqu'on échange les parties 1 et 2 d'un C.C.G.

$$\langle u_1\tau_1 k_1+u_2\tau_2 k_2|\alpha u\tau k\rangle = (-1)^{k_1+k_2+k+p} \langle u_2\tau_2 k_2+u_1\tau_1 k_1|\alpha u\tau k\rangle \qquad (3)$$

- avec si $u_1 \equiv u_2$ $\quad p=0$ si u_s (a)
  $\quad p=1$ si u_a (b)
- avec si $u_1 \neq u_2$ $\quad p$ arbitraire $= 0$ (c) .

Les relations (3)a et (3)b imposées successivement au système à résoudre $[(11)(11)](11)k$ conduisent à deux systèmes distincts correspondant à $(11)_s$ et $(11)_a$.

Donc, dans le cas général d'un carré de Kronecker, les relations (3)a et (3)b permettent de séparer les représentations symétriques et antisymétriques et diminuent alors la dégénérescence externe.

Ainsi le cas (22)(22) donne :

$$(22)\otimes\{2\} = (00)_s+(11)_s+2(22)_s+(14)_s+(41)_s+(06)_s+(60)_s+(33)_s+(44)_s$$

$$(22)\otimes\{1^2\} = (11)_a+(22)_a+(14)_a+(41)_a+(03)_a+(30)_a+(33)_a+(25)_a+(52)_a.$$

Les relations (3)a et (3)b séparent les systèmes correspondants aux deux types de représentations (11), (33), (14) et (41) et séparent le système (22) en deux systèmes, l'un correspondant à (22)a, l'autre correspondant aux 2 solutions $(22)_s$ et $(22)'_s$, c'est-à-dire possédant encore une dégénérescence externe double.

Remarquons que la relation (3)c permet de déduire les coefficients $\langle(22)\tau_2 k_2+(11)\tau_1 k_1|\alpha u\tau k\rangle$ des coefficients $\langle(11)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|\alpha u\tau k\rangle$.

III. Liens entre l'hermiticité des opérateurs tensoriels couplés et la levée partielle de la dégénérescence.

1°) Rappel de la définition générale de l'hermiticité d'un opérateur tensoriel.

On a vu au chapitre I qu'on sait définir l'adjoint d'une composante T^k_q d'un opérateur tensoriel en écrivant :

$$\langle\phi|T^{k+}_q|\phi'\rangle = \langle\phi'|T^k_q|\phi\rangle^* = \langle\phi'|T^k_q|\phi\rangle \quad \text{(réel)} .$$

On trouve, en particulier pour les opérateurs monoélectroniques V^k_q standards agissant dans une configuration ℓ^n et pour les opérateurs $V^k_q(\ell\ell')$ agissant dans $(\ell+\ell')^n$, que les adjoints sont respectivement:

$$V^{k+}_q = (-1)^q V^k_{-q}$$

$$V^k_q(\ell\ell')^+ = (-1)^{\ell+\ell'+q} V^k_{-q}(\ell'\ell) .$$

On peut alors définir la conjugaison hermitique des opérateurs tensoriels de la façon suivante : S^k est l'opérateur hermitique conjugué de T^k, soit $S^k = T^{k+}$, si ses composantes vérifient

$$S^k_q = (-1)^{p+q} T^{k+}_{-q}$$ et on dit par extension de la notion habituelle que T^k est hermitique si on a les relations

$$T^k_q = (-1)^{p+q} T^{k+}_{-q} .$$

Cette définition fait intervenir une phase p arbitraire. Nous avons choisi ici la convention d'Edmonds (1960) : T^k est un opérateur tensoriel hermitique si on a les relations :

$$T^k_q = (-1)^{k+q} T^{k+}_{-q} .$$

Ce choix conduit, en particulier, au fait que les opérateurs couplés X^K_Q construits à partir de 2 opérateurs T^k_q d'hermiticité définie, sont eux-mêmes de type d'hermiticité déterminé. Nous verrons que cette propriété, qui n'est pas vraie par exemple si on choisit la convention de Racah p=0 , peut être imposée aux opérateurs couplés de $SU_3 \supset R_3$ et le choix de ces opérateurs biélectroniques classés d'hermiticité définie entraîne alors pour les états $SU_3 \supset R_3$ correspondant à la même classification une levée partielle des dégénérescences.

On montre que selon cette définition :

$V^k(\ell\ell)$ est hermitique ou antihermitique suivant que k est pair ou impair et qu'on peut définir

$V^{k^+}(\ell\ell') = V^k(\ell\ell') + (-1)^{\ell+\ell'+k} V^k(\ell'\ell)$ hermitique

$V^{k^-}(\ell\ell') = V^k(\ell\ell') - (-1)^{\ell+\ell'+k} V^k(\ell'\ell)$ antihermitique .

2°) Opérateurs tensoriels couplés par rapport à R_3 .

Si on considère un opérateur couplé $X^K_Q = \sum_{q_1 q_2} \langle k_1 q_1 k_2 q_2 | KQ \rangle T^{k_1}_{q_1} U^{k_2}_{q_2}$ et si on suppose que T^{k_1} et U^{k_2} ont une hermiticité déterminée au sens où on l'a définie, on montre en comparant les expressions $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | X^K_Q | j'_1 m'_1 j'_2 m'_2 \rangle$ et $\langle j'_1 m'_1 j'_2 m'_2 | X^K_{-Q} (-1)^{K+Q} | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle$ que X^K est hermitique si T^{k_1} et U^{k_2} sont de même hermiticité, antihermitique dans le cas contraire. Ce résultat s'applique en particulier aux produits d'opérateurs $V^{k^+}(\ell\ell')$ et $V^{k^-}(\ell\ell')$ d'hermiticité définie.

3°) Conséquences pour les opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^n$ classés par rapport à $SU_3 \supset R_3$.

Les générateurs de $SU_3(d+s)$ s'écrivent :

$$(11)V^1(dd) \equiv \frac{1}{\sqrt{10}} L \quad \text{et}$$

$$(11)V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}} [V^2(dd)+2\{V^2(ds)+V^2(sd)\}] \ .$$

D'après de que nous avons dit $(11)V^1(dd)$ est antihermitique ($\equiv V^k(\ell\ell)$ avec k impair) et $(11)V^{+2}$, somme d'un opérateur $V^2(dd)$ hermitique et de $\{V^2(ds)+V^2(sd)\}$ hermitique, est un opérateur hermitique.

Les autres opérateurs monoélectroniques se transforment comme la représentation $(22)022'34$ et la seule ambiguïté est la détermination des opérateurs $(22)2$ et $(22)2'$, les autres étant d'hermiticité définie. On va donc chercher à imposer $(22)2^+$ et $(22)2^-$ hermitique et antihermitique, c'est-à-dire à chercher si on peut définir

$(22)2^+$ orthogonal à $(11)V^{+2}$ et de la forme $\alpha V^2(\ell\ell)+\beta\{V^2(ds)+V^2(sd)\}$

et $(22)2^-$ orthogonal à $(11)V^{+2}$ et $(22)2^+$ et de la forme

$$\beta'\{V^2(ds)-V^2(sd)\}.$$

La solution existe et est unique ; elle correspond bien aux opérateurs choisis par S. Feneuille :

$$(22)2^+ = \frac{1}{\sqrt{15}} [\sqrt{8}\ V^2(dd) - \sqrt{\frac{7}{2}}\ \{V^2(ds)+V^2(sd)\}]$$

$$(22)2^- = \frac{1}{\sqrt{2}} [V^2(ds)-V^2(sd)] \ .$$

D'après ce qu'on a vu, les éléments de matrices réduits du générateur $(11)V^{+2}$ entre les états de la représentation (22) sont calculés par

comparaison des 2 expressions (1) et (2)

$$(1)\quad [(11)V^{+2}_{q_1}\ ,\ (22)\tau_2 V^{k_2}_{q_2}] = \sum_{\tau k q} (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & 0 & -q_1 \end{pmatrix}$$

$$\langle (22)\tau_2 k_2 \| (11)V^{+2} \| (22)\tau k\rangle \{(22)\tau V^{k}_{q}\}$$

$$(2)\quad [V^{k_1}_{q_1}\ ,\ V^{k_2}_{q_2}] = \sum_{k_3 q_3} \ldots\ldots V^{k_3}_{q_3} \quad \text{(relations de commutation des } V^{k}_{q}\text{)}.$$

On peut écrire le théorème de Wigner-Eckart pour les états $|(22)k\rangle$ et obtenir

$$(3)\quad (11)V^{+2}_{q_1}|(22)\tau_2 k_2 q_2\rangle = \sum_{\tau k q} (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & 0 & -q_1 \end{pmatrix}$$

$$\langle (22)\tau_2 k_2 \| (11)V^{+2} \| (22)\tau k\rangle |(22)\tau k q\rangle \ .$$

En remplaçant dans le commutateur (1) les opérateurs $(11)V^{+2}_{q_1}$ et $(22)\tau_2 V^{k_2}_{q_2}$ par leur expression en fonction des V^{k}_{q} et en exprimant les commutateurs obtenus à l'aide de (2) on trouve pour (1) un développement du type

$$(4)\quad [(11)V^{+2}_{q_1}, (22)\tau_2\ V^{k_2}_{q_2}] = \sum_{\tau' k' q'} f(\tau' k' q')\{(22)\tau'\ V^{k'}_{q'}\} \ .$$

En identifiant les 2 développements (1) et (4) on en déduit la valeur des éléments de matrice $\langle (22)\tau_2 k_2 \| (11)V^{+2} \| (22)\tau k\rangle$ [cf.Appendice II].

En conséquence les relations (3) et (1) établissent une correspondance entre le choix des opérateurs $(22)\tau V^{k}_{q}$ et les états $|(22)\tau k q\rangle$. En particulier on peut noter $(22)2^{+},2^{-}$ les états correspondants aux opérateurs $(22)V^{\pm 2}$. Par abus de langage et par souci de raccourci d'expression nous parlons dans la suite de cet exposé d'états $k^{\pm}$ "hermitiques" et "antihermitiques".

On voit donc que le choix d'opérateurs monoélectroniques d'hermiticité définie $(22)V^{\pm 2}$ a levé la dégénérescence double des états $|(22)\tau 2\rangle$.

Les éléments de matrice du générateur $(11)V^{+2}$ entre les états $|(22)k^{\pm}\rangle$ sont donnés dans l'appendice II et on remarque que $\langle\psi||V^{+2}||\psi'\rangle = 0$ entre 2 états de "même hermiticité".

4°) Conjugaison hermitique pour un opérateur quelconque classé de $SU_3 \supset R_3$ $[(\lambda\mu)\tau\ T^k_q]$.

On a vu dans le Chapitre I que $(\mu\lambda)$ est la représentation conjuguée de la représentation $(\lambda\mu)$ de SU_3 et on montre que l'adjoint d'un opérateur se transformant comme $(\lambda\mu)T^k_q$ dans les opérations de SU_3 et R_3 s'écrit :

(1) $(\lambda\mu)\ T^{k+}_q = (-1)^{q+x}\ (\mu\lambda)\ T^k_{-q}$

où x est facteur de phase d'ensemble pour $(\lambda\mu)$ donnée.

Pour une représentation autoconjuguée, $(\lambda=\mu)T^{k+}_q = (-1)^q\ (\lambda=\mu)T^k_{-q}$ soit $T^{k+}_q = (-1)^q\ T^k_{-q}$, et d'après la définition choisie pour l'hermiticité et les résultats précédents on doit donc avoir les résultats suivants :

- si k n'est pas dégénéré,

  $(\lambda=\mu)T^k$ est hermitique si k pair : Ex. $(\lambda=\mu)T^{2+}$

  $(\lambda=\mu)T^k$ est antihermitique si k impair : Ex. $(\lambda=\mu)T^{1-}$

- si k est doublement dégénéré on peut définir $(\lambda=\mu)T^{k+}$ hermitique

et $(\lambda=\mu)T^{k^-}$ antihermitique comme pour les cas précédents $(22)V^{\pm 2}$.

- si k est plus de 2 fois dégénéré on peut définir 2 groupes d'opérateurs de type k^+ et k^- ; dans ce cas l'hermiticité ne résoud plus la dégénérescence des états $(\lambda=\mu)^{k^\pm}$ correspondants mais la lève partiellement.

Pour une représentation quelconque $(\lambda\neq\mu)$ la relation (1) montre qu'on peut définir des opérateurs d'hermiticité donnée en associant les composantes $(\lambda\mu)T^k_q$ et $(\mu\lambda)T^k_{-q}$. On peut écrire en effet :

$$(\lambda\mu)T^{k^+}_q + (\mu\lambda)T^{k^+}_q = (-1)^q(\mu\lambda)T^k_{-q} + (-1)^q(\lambda\mu)T^k_{-q} \quad \text{et}$$

$$(\lambda\mu)T^{k^+}_q - (\mu\lambda)T^{k^+}_q = (-1)^q(\mu\lambda)T^k_{-q} - (-1)^q(\lambda\mu)T^k_{-q}$$

soit symboliquement :

$$[(\lambda\mu)+(\mu\lambda)]T^{k^+}_q = (-1)^q[(\mu\lambda)+(\lambda\mu)]T^k_{-q} = (-1)^q[(\lambda\mu)+(\mu\lambda)]T^k_{-q} \qquad (2)$$

$$[(\lambda\mu)-(\mu\lambda)]T^{k^+}_q = (-1)^q[(\mu\lambda)-(\lambda\mu)]T^k_{-q} = -(-1)^q[(\lambda\mu)-(\mu\lambda)]T^k_{-q} \quad . \qquad (3)$$

a) Si on suppose d'abord k non dégénéré les relations (2) et (3) montrent qu'on peut construire

$[(\lambda\mu)+(\mu\lambda)]T^k$ hermitique si k est pair et antihermitique si k est impair

$[(\lambda\mu)-(\mu\lambda)]T^k$ antihermitique si k est pair et hermitique si k est impair

par exemple $[(14)+(41)]1^-2^+3^-4^+$

$[(14)-(41)]1^+2^-3^+4^-$.

b) Supposons maintenant k dégénéré 2 fois.

On a vu, dans le cas d'une représentation autoconjuguée qu'on a, si les valeurs de k ne sont pas dégénérées $(\lambda=\mu)1^-,2^+,3^-,4^+,\ldots\ldots$;

si k est doublement dégénéré on a vu qu'on peut définir

$(\lambda=\mu)....2^+2^-$ ..... .

Dans le cas d'une représentation non autoconjuguée et si les valeurs de k ne sont pas dégénérées on sait qu'on a $(\lambda\mu+\mu\lambda)1^-2^+3^-4^+....$

$(\lambda\mu-\mu\lambda)1^+2^-3^+4^-....$.

Si la valeur $k=3$ par exemple est doublement dégénérée on peut prévoir que, de la même façon qu'on a pu séparer $(22)2^+2^-$ on doit pouvoir définir des opérateurs $(\lambda\mu\pm\mu\lambda)k^\pm$ soit les états associés :

$$\left|\begin{array}{l}(\lambda\mu+\mu\lambda)1^-,2^+,3^-,3^+,4^+...\\(\lambda\mu-\mu\lambda)1^+,2^-,3^+,3^-,4^-...\end{array}\right. .$$

Si la dégénérescence est supérieure l'hermiticité doit seulement permettre de séparer opérateurs et états associés en 2 catégories + et - .

Nous allons voir maintenant quelles conséquences la notion d'hermiticité a dans notre méthode de calcul des C.C.G. et comment elle a permis de simplifier les cas dégénérés rencontrés.

5°) Application aux opérateurs couplés (biélectroniques) classés dans $SU_3 \supset R_3$.

Nous n'essayons pas de parler dans un cas général et nous considérons le cas des opérateurs biélectroniques faisant apparaître la plus grande dégénérescence, c'est-à-dire ceux construits à partir des produits $(22)\times(22)$.

On cherche à construire des opérateurs classés par rapport à $SU_3 \supset R_3$

$$[(22)(22)]\alpha(\lambda\mu)\tau\ O^k_q = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle (22)\tau_1 k_1 + (22)\tau_2 k_2 | \alpha(\lambda\mu)\tau k\rangle \{(22)V^{\pm k_1}(22)V^{\pm k_2}\}^k_q .$$

On sait que la méthode de Nutter et Nielson que nous avons utilisée pour déterminer les C.C.G. conduit à la résolution d'autant de systèmes linéaires que d'ensembles de valeurs $[(\lambda_1\mu_1)\times(\lambda_2\mu_2)](\lambda\mu)k$ données, systèmes dégénérés en principe $\alpha\tau$ ou $2\alpha\tau$ fois.

En fait le choix des opérateurs monoélectroniques $(22)2^+,2^-$ d'hermiticité définie, assure la propriété $\langle(22)\tau k\|V^{+2}\|(22)\tau' k'\rangle = 0$ entre 2 états de même "hermiticité" ; d'après la forme des relations (4) du paragraphe I de ce chapitre, exprimant la valeur des coefficients des inconnues dans les systèmes linéaires donnant les C.C.G., cette propriété entraîne une séparation automatique du système à résoudre en 2 sous-systèmes indépendants correspondant respectivement aux C.C.G. $\langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|\lambda k\rangle$ de type $\begin{cases}(++)+\\(--)+\end{cases}$ et $\begin{cases}(+-)-\\(-+)-\end{cases}$ où les 2 signes entre parenthèses caractérisent "l'hermiticité" des états $(22)\tau_1 k_1$ et $(22)\tau_2 k_2$ et le 3ème signe caractérise "l'hermiticité" totale résultante de l'état $|\lambda k\rangle$; les C.C.G. ainsi obtenus conduisent à une séparation des opérateurs couplés de type + et -

$$[(22)(22)](\lambda)\ 0^{k^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|\lambda k^+\rangle \times \{(22)V^{\pm k_1}\ (22)V^{\pm k_2}\}^{k^+}_{q}$$

$$[(22)(22)](\lambda)\ 0^{k^-} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|\lambda k^-\rangle \times \{(22)V^{\pm k_1}\ (22)^{\mp k_2}\}^{k^-}_{q} \quad .$$

On voit que l'utilisation des propriétés d'hermiticité conduit à une levée automatique en général partielle des dégénérescences et à une levée complète dans le cas d'une dégénérescence double. Ainsi le choix initial de 2 opérateurs monoélectroniques $(22)2^+,2^-$ qui conserve

la propriété — $\langle(22)k\|V^{+2}\|(22)k'\rangle = 0$ entre 2 états de même type d' "hermiticité" —, déjà vérifiée par tous les autres opérateurs mono-électroniques $(11)V^k$ et $(22)V^k$, entraîne que tout système de C.C.G.: $\langle\lambda_1 k_1+\lambda_2 k_2|\lambda k\rangle$, ou λ_1 et $\lambda_2 = (11)$ ou (22), se sépare en 2 sous-systèmes et donc que tout opérateur à 2 particules construit à partir des opérateurs $(11)V^k$ et $(22)V^k$ peut être construit d'hermiticité déterminée comme nous allons le voir en examinant successivement les différents cas qui peuvent se présenter.

a) Cas d'une représentation autoconjuguée 2 fois dégénérée en k .

Exemple : $[(22)(22)]\begin{matrix}(33)_s 3,3' \\ (33)_a 3,3'\end{matrix}$.

On suppose qu'on a déjà séparé les deux cas $(33)_s$ et $(33)_a$ à l'aide des relations (3)a et (3)b du paragraphe II, les systèmes à résoudre ne possèdent plus en principe que la dégénérescence interne 3,3' . Mais, d'après ce qui vient d'être dit, le système $(33)_s 3$ se sépare automatiquement en 2 sous-systèmes correspondant à $(33)_s 3^+$ et $(33)_s 3^-$. La forme de sous-matrice de V^{+2} pour k=3 est alors :

V^{+2}	$(33)3^+$	$(33)3^-$ .....
3^+	0	$7\sqrt{30}/10$
3^-	$7\sqrt{30}/10$	0
⋮		

l'ensemble de la matrice V^{+2} pour toutes les valeurs de k vérifie toujours la propriété $\langle\psi\|V^{+2}\|\psi'\rangle = 0$ si ψ,ψ' ont même "hermiticité"; elle est donnée dans le tableau de résultats III.

b) Cas de 2 représentations $(\mu\lambda)$ et $(\lambda\mu)$ non dégénérées en k .

Exemple : $[(22)(22)](14)_s$ et $(41)_s 1,2,\ldots 5$.

D'après ce qui a été dit le système obtenu pour une valeur de k se sépare automatiquement en 2 sous-systèmes "hermitique" et "anti-hermitique". Les solutions obtenues correspondent donc en fait aux parties hermitique et antihermitique que l'on peut construire à partir de $(14)k$ et $(41)k$, c'est-à-dire correspondent comme on l'a vu à :

$S_1^{\pm} = [14+41]k^{\pm} = [(14)k+(41)k]$ de type + si k pair, de type - si k impair

$S_2^{\pm} = [14-41]k^{\mp} = [(14)k-(41)k]$ de type - " , de type + "

La matrice de V^{+2} pour les solutions S_1 et S_2 a la forme ci-dessous et verifie toujours bien la relation $\langle\psi||V^{+2}||\psi'\rangle = 0$ si ψ,ψ' ont même "hermiticité".

V^{+2}	(14+41) 1^-	(14-41) 2^-	(14+41) 3^-	(14-41) 4^-	(14-41) 1^+	(14+41) 2^+	(14-41) 3^+	(14+41) 4^+
$(+)1^-$								
$(-)2^-$			0			A		
$(+)3^-$								
⋮								
$(-)1^+$								
$(+)2^+$			A^t			0		
⋮								
$(+)4^+$								

Figure (1)

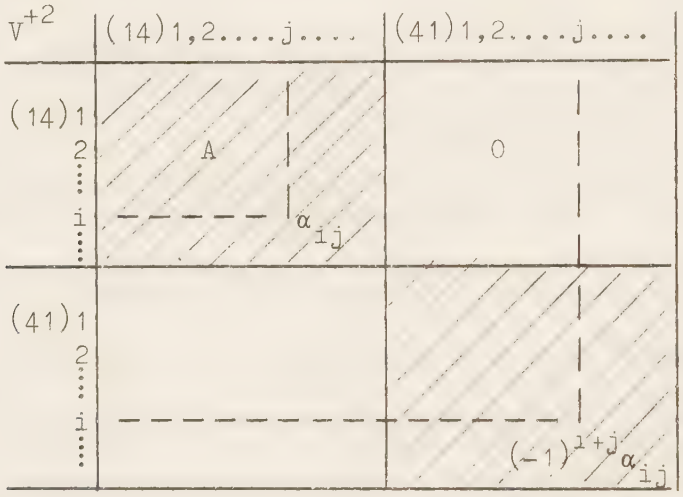
On déduit de la forme de cette matrice les solutions $(14)k$ et $(41)k$

$$(14)k = \frac{1}{\sqrt{2}} [S_1^{k^+} + S_2^{k^-}] = \frac{1}{\sqrt{2}} [(14+41)k^{\pm} + (14-41)k^{\mp}]$$

$$(41)k = \frac{1}{\sqrt{2}} [S_1^{k^+} - S_2^{k^-}] = \frac{1}{\sqrt{2}} [(14+41)k^{\pm} - (14-41)k^{\mp}]$$

$(14)k$ et $(41)k$ ne sont plus des états "d'hermiticité définie" mais s'expriment simplement en fonction des états $+$ et $-$.

On obtient alors pour V^{+2} la matrice (donnée tableau III) de la forme ci-dessous



où A est une matrice dont les éléments sont égaux à la matrice A de la figure (1).

Si on désire construire des opérateurs biélectroniques d'hermiticité définie, les C.C.G. à utiliser sont ceux donnés par les solutions $(14 \pm 41)k^{\pm}$ mais les solutions $(14)k$ et $(41)k$ sont nécessaires pour calculer les C.C.G. correspondant aux opérateurs à 3 particules à l'aide des équations linéaires (6) du premier paragraphe.

c) Cas de 2 représentations $(\mu\lambda)$ et $(\lambda\mu)$ avec dégénérescence double en k .

Exemple : $[(22)(22)]\ (25)....3,3'$

$(52)....3,3'$.

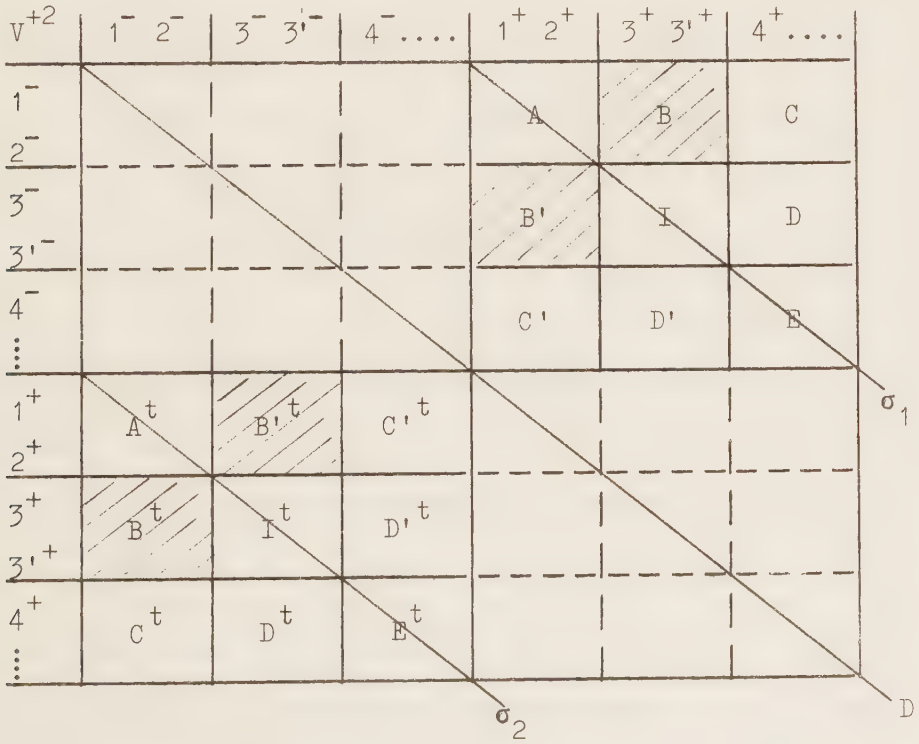
Cette fois, pour $k=3$, les 2 sous-systèmes "hermitique" et "antihermitique" sont doublement dégénérés. Une fois choisies des solutions arbitraires on est dans la situation suivante : on veut construire les états $(25+52)3^+,3^-$ et $(25-52)3^+,3^-$ et on a obtenu pour le sous-système hermitique :

2 solutions arbitraires S_1^+, S_2^+ mélanges de $(25+52)3^+$ et $(25-52)3^+$

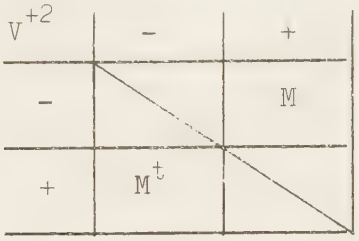
et pour le sous-système antihermitique :

2 solutions arbitraires S_1^-, S_2^- mélanges de $(25+52)3^-$ et $(25-52)3^-$

solutions qui donnent pour V^{+2} une matrice de la forme :



Or l'étude des représentations $(\lambda\mu)k$ et $(\mu\lambda)k$ non dégénérées en k faite au paragraphe précédent a montré que les états $(\lambda\mu)k$ et $(\mu\lambda)k$ se déduisent facilement des états $(\lambda\mu \pm \mu\lambda)k^{\pm}$ si on a pour V^{+2} la forme :



On voit sur la figure précédente que cette forme est obtenue si l'on cherche les combinaisons linéaires

$$\begin{cases} (25+52)3^{+} = \alpha\ S_1^{+} + \beta\ S_2^{+} \\ (25-52)3^{+} = \beta\ S_1^{+} - \alpha\ S_2^{+} \end{cases}$$ d'une part

et

$$\begin{cases} (25+52)3^{-} = \alpha'\ S_1^{-} + \beta'\ S_2^{-} \\ (25-52)3^{-} = \beta'\ S_1^{-} - \alpha'\ S_2^{-} \end{cases}$$ d'autre part

qui assurent la symétrie par rapport aux diagonales secondaires σ_1 et σ_2 , c'est-à-dire qui assurent l'égalité des sous-matrices telles que B=B' , C=C' ... . Ces solutions existent et sont uniques et nous les avons déterminées. On en déduit alors les états $(25)3,3'$ et $(52)3,3' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(25+52)3^{\pm} \pm (25-52)3^{\mp}\right]$ qui conduisent pour V^{+2} à la sous-matrice k=3 ci-dessous et à une matrice de V^{+2} diagonale en représentations de SU_3 .

V^{+2}	...(25)3	(25)3'...	..... (52)3	(52)3'
(25)3	$3\sqrt{14}/4$	$-7\sqrt{330}/60$	0	
(25)3'	$-7\sqrt{330}/60$	$1\sqrt{14}/4$		
(52)3	0		$-3\sqrt{14}/4$	$7\sqrt{330}/60$
(52)3'			$7\sqrt{330}/60$	$-1\sqrt{14}/4$

Ainsi les propriétés d'hermiticité des opérateurs ont permis de lever la dégénérescence interne double d'une représentation non autoconjuguée. On a pu, comme on le supposait dans le paragraphe précédent, construire des états $(25+52)3^{\mp}$ et $(25-52)3^{\pm}$.

d) Cas des représentations autoconjuguées avec dégénérescence double en k .

Exemples : $[(22)(22)](22)_s 0,2,2',3,4$
$(22)'_s 0,2,2',3,4$
$(22)_a 0,2,2',3,4$

et $[(11)(22)](22)0,2,2',3,4$
$(22)'0,2,2',3,4$.

- On considère d'abord les cas $[(11)(22)](22),(22)'$.

Appelons α la dégénérescence externe (ici $\alpha=2$) et appelons τ la dégénérescence interne. Pour les valeurs de k non dégénérées $\tau=1$ et la dégénérescence totale du système à résoudre $[(11)(22)](22)k$ est en principe $\alpha\tau=2$. Mais on sait qu'on a séparation automatique en 2 sous-systèmes conduisant donc immédiatement aux solutions $(22)k^{\pm}$ et $(22)'k^{\mp}$ soit ici :

$$[(11)(22)](22)0^+,(22)'0^- \quad ; \quad (22)3^-,(22)'3^+ \quad ; \quad (22)4^+,(22)4^-$$

Par contre la valeur de $k=2$ est doublement dégénérée ($\tau=2$) et la dégénérescence totale du système $[(11)(22)](22)2$ est en principe $\alpha\tau=4$. Cette fois la séparation automatique conduit à 2 sous-systèmes hermitique et antihermitique possédant une dégénérescence double.

Ainsi le sous-système hermitique permet de déterminer 2 solutions arbitraires S_1^+ et S_2^+ combinaisons des solutions souhaitées $(22)2^+$ et $(22)'2^+$ et le sous-système antihermitique permet de déterminer 2 solutions arbitraires S_1^- et S_2^- combinaisons des solutions souhaitées $(22)2^-$ et $(22)'2^-$.
La matrice de l'opérateur V^{+2} obtenue à l'aide de ces solutions n'est pas diagonale en représentations de SU_3 . Or V^{+2} est un générateur de SU_3 . On sait donc a priori qu'on peut trouver des combinaisons linéaires des solutions arbitraires $S_{1,2}^+$ et $S_{1,2}^-$ assurant que la matrice de V^{+2} soit diagonale par rapport aux représentations de SU_3. L'étude de la matrice de V^{+2} obtenue avec les solutions arbitraires fournit alors facilement les relations nécessaires pour obtenir les solutions cherchées $(22)2^+,2^-$ $(22)'2^+,2^-$.

- Le cas $[(22)(22)](22)_{\substack{s \\ (22)'_s \\ (22)_a}}$ $0,2,2',3,4$ est plus complexe.

On considère d'abord les valeurs de k non dégénérées.

On constate que la séparation en 2 systèmes λ_s et λ_a à l'aide des relations (3a) et (3b) de II est équivalente, pour les valeurs de k non dégénérées, à la séparation par l'hermiticité en k^+ et k^- et cette dernière n'apporte donc rien de plus.

Ainsi puisqu'à $(22)_a$ correspond les solutions 0^-, 3^+, 4^- les cas $(22)_s$ et $(22)'_s$ correspondent à des systèmes doublement dégénérés 0^+, 3^-, 4^+ et on obtient des solutions $(22)k^{\pm}$ combinaisons des solutions souhaitées $(22)_s k$ et $(22)'_s k$.

Pour la valeur dégénérée $k=2$, l'hermiticité sépare cette fois le sous-système $(22)_a 2$ en deux sous-systèmes correspondant aux solutions $(22)_a 2^+$ et $(22)_a 2^-$.

Le sous-système $(22)_s 2$ se sépare aussi en deux sous-systèmes + et - , chacun doublement dégénéré, dont les solutions correspondent respectivement à des combinaisons arbitraires de $(22)_s 2^+$ et $(22)'_s 2^+$ d'une part et $(22)_s 2^-$ et $(22)'_s 2^-$ d'autre part.

Finalement la situation est la suivante : pour toutes les valeurs de k $(0^+ 2^+ 2^- 3^- 4^+)$ les solutions obtenues sont des combinaisons arbitraires de 2 représentations $(22)_s$ et $(22)'_s$

$$[(22)_s k] = \alpha\ (22)_s k + \beta\ (22)'_s k$$

Les 2 représentations $(22)_s$ et $(22)'_s$ correspondent à une dégénérescence externe et la seule chose qui ait un sens est donc que les choix des différentes combinaisons pour les différentes valeurs de k soient compatibles entre eux, c'est-à-dire conduisent à une matrice de V^{+2} diagonale en (22) et $(22)'$.

On peut donc choisir $(22)0^+ = [(22)0^+]$
$(22)'0^+ = [(22)'0^+]$ et chercher, grâce à l'étude de la matrice de V^{+2} obtenue avec les solutions arbitraires, quelles sont les combinaisons à choisir pour chaque valeur de k pour que la matrice de V^{+2} soit diagonale en (22) et $(22)'$ (chaque matrice étant identique à la matrice connue par ailleurs $\langle (22)\tau_1 k_1 \| V^{+2} \| (22)\tau'_1 k'_1 \rangle$).

e) Cas de dégénérescence supérieure.

Exemple : $[(22)(22)](44)4,4',4''$.

C'est le seul cas de dégénérescence rencontré non résolu entièrement par les propriétés d'hermiticité. En effet, l'hermiticité sépare le système $[(22)(22)](44)4$ en 2 sous-systèmes : l'un "hermitique" doublement dégénéré et correspondant donc à 2 solutions arbitraires 4_a^+ et 4_b^+, l'autre "antihermitique" correspondant à la solution $(44)4^-$. La forme de la matrice de V^{+2} est la suivante :

V^{+2}	4_a^+	4_b^+	4^-
4_a^+	0	0	x
4_b^+	0	0	x
4^-	x	x	0

La propriété "$\langle\psi||V^{+2}||\psi'\rangle = 0$" entre 2 états de même hermiticité est bien conservée. La séparation des 2 solutions 4_a^+ et 4_b^+ reste arbitraire.

L'arbitraire de la détermination des C.C.G. $\langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|(44)4_a^+\rangle$ et $|(44)4_b^+\rangle$ entraîne bien sûr le même arbitraire pour les éléments de matrice réduits de V^{+2} et on peut montrer que les 2 éléments de matrice $\langle(44)4_a||V^{+2}||(44)4^-\rangle$ et $\langle(44)4_b||V^{+2}||(44)4^-\rangle$ sont reliés aux C.C.G. par l'équation :

$$\langle(44)4_a||V^{+2}||(44)4^-\rangle\langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|(44)4_a\rangle + \langle(44)4_b||V^{+2}||(44)4^-\rangle$$

$$\langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2 k_2|(44)4_b\rangle = \sum_{\tau_1' k_1'} \langle(22)\tau_1' k_1'+(22)\tau_2 k_2|(44)4^-\rangle(-1)^{k_1+k_2}$$

$$9\begin{Bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ k_1' & k_2 & k_1 \end{Bmatrix}\langle(22)\tau_1 k_1||V^{+2}||(22)\tau_1' k_1'\rangle +$$

$$\sum_{\tau_2' k_2'} \langle(22)\tau_1 k_1+(22)\tau_2' k_2'|(44)4^-\rangle(-1)^{k_1+k_2'} 9\begin{Bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ k_2' & k_1 & k_2 \end{Bmatrix}\langle(22)\tau_2 k_2||V^{+2}||(22)\tau_2' k_2'\rangle$$

$$= \text{Cste} .$$

En résumé, de l'étude des différents cas particuliers traités, on peut dire qu'on a montré que l'hermiticité résoud complètement les cas de dégénérescences doubles internes et externes des états $SU_3 \supset R_3$, les solutions ainsi obtenues permettant de construire des opérateurs couplés d'hermiticité déterminée, et que l'hermiticité réduit les cas de dégénérescence supérieure. Nous nous proposons de comparer maintenant les propriétés de la base d'états $SU_3 \supset R_3$ ainsi obtenue avec celles proposées par différents auteurs.

IV. Comparaison entre les différentes bases $SU_3 \supset R_3$.

1°) Problème de la caractérisation complète des vecteurs de base de SU_n .

On sait que SU_n est un groupe à n^2-1 paramètres et donc que n^2-1 opérateurs indépendants commutant entre eux sont nécessaires pour caractériser les vecteurs de base d'une représentation de SU_n . Les $(n-1)$ invariants fondamentaux et les $(n-1)$ opérateurs infinitésimaux H_i fournissent $(n-1)+2(n-1)$ nombres quantiques. Il manque donc $\frac{(n-1)(n-2)}{2}$ opérateurs commutant entre eux et avec les H_i pour caractériser les états complètement. Dans le cas de SU_3 , $\frac{(n-1)(n-2)}{2}=1$ et un seul "label" supplémentaire est nécessaire. Elliott a montré que l'invariant de Casimir de SU_2 : $G'_{SU_2} = H_1^2+E_\alpha E_{-\alpha}+E_{-\alpha}E_\alpha$ est un opérateur répondant au problème et a ainsi montré que le problème de la définition complète d'une base de SU_3 est résolu par la réduction "canonique" $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$, les valeurs propres des invariants de Casimir des groupes SU_3 , SU_2 , U_1 et des opérateurs H_i de SU_3 caractérisant les états de base. Ce résultat se généralise d'ailleurs pour SU_n , le problème de la caractérisation complète des vecteurs étant résolu par une factorisation $SU_n \supset U_1 \times [SU_{n-1} \supset U_1 \times [SU_{n-2}[\ldots]]]$.

La réduction $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$ est utilisée en théorie des particules élémentaires, mais en physique atomique et nucléaire on veut en général faire apparaître les groupes de rotation de spin et d'orbite et c'est la réduction $SU_3 \supset R_3 \supset R_2$ qui a un sens physique ; dans ce cas le problème de la caractérisation des états SU_3 demeure.

On sait qu'en général dans les calculs physiques on utilise une base d'états définie par les valeurs propres d'opérateurs commutant entre eux qui sont toutes entières ou $\frac{1}{2}$ entières dans la base commune. Une conséquence est que tous les intermédiaires de calcul s'expriment comme des nombres d'irrationnalité maximale en racine carrée du type $a\sqrt{b}/c$ et en particulier ne mélangent jamais deux irrationnalités différentes (telles que $a\sqrt{2}+b\sqrt{3}$). Cette caractéristique entraîne que tous les calculs de coefficients angulaires, et notamment ceux effectués par des programmes, peuvent être conduits d'une façon relativement simple sous forme exacte $a\sqrt{b}/c$, forme qui présente bien sûr de multiples avantages et permet, en particulier, de faire toute vérification utile ou toute étude théorique souhaitée avec les résultats obtenus.

Ainsi on comprend que la façon idéale de caractériser complètement les états dégénérés $SU_3 \supset R_3$ serait de trouver un opérateur supplémentaire à diagonaliser qui admette des valeurs propres entières ou $\frac{1}{2}$ entières dans la base commune, problème malheureusement insoluble. Pour obtenir une base complètement définie, plusieurs types de méthodes ou de procédés ont été proposés que l'on peut diviser en 3 catégories :

a) Des procédés empiriques, liés au problème particulier traité, et qui consistent par exemple, comme nous l'avons fait dans le cas dégénéré $(44)4,4',4''$, à lever les indéterminations par k solutions arbitraires orthonormées, en égalant un certain nombre de C.C.G. à zéro dans les systèmes linéaires dégénérés.

Du point de vue des calculs physiques ces procédés sont suffisants et ne mélangent pas les irrationnalités.

Par contre cette façon de faire a 2 désavantages dont le premier, bien sûr, est qu'aucune loi ne peut être énoncée et utilisée pour relier des C.C.G. entre eux et qu'on ne peut donc pas profiter dans les calculs de leurs propriétés éventuelles.

Le second inconvénient est, qu'en fait, dès que la dégénérescence réelle est assez grande, les solutions recherchées sous forme exacte $a\sqrt{b}/c$ font intervenir des nombres tellement grands que la forme $a\sqrt{b}/c$ n'a plus d'intérêt sauf pour les vérifications et que, souvent, les dépassements de capacité en machine empêchent la résolution des systèmes.

b) Des méthodes qui utilisent un nombre quantique simple supplémentaire pour nommer les états mais qui conduisent à des fonctions de base non orthonormées qui ne sont pas des fonctions propres d'un ensemble complet d'opérateurs commutants.

Les physiciens nucléaires utilisent, en général, les états $SU_3 \supset R_3$ définis par Elliott à partir des états de la réduction canonique $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$, sous forme d'intégrales qui expriment que le nombre quantique K supplémentaire est une projection de L sur un axe repérable dans le système nucléaire. Cette base n'est pas orthonormée, elle ne permet pas d'utiliser directement l'algèbre de Racah, elle conduit à des matrices non hermitiques et le calcul des éléments de matrice d'un opérateur même simple comme le moment quadrupolaire ($\equiv V^{+2}$) est donné par des intégrales compliquées. Ces états n'ont pas de lien direct avec ceux que nous avons définis. Certains auteurs (Vergados (1968), Draayer (1973)) réorthonormalisent les états d'Elliott en restant le plus proche possible des états de départ, mais on a pu voir en comparant certains résultats publiés par Vergados avec

les nôtres que la base ainsi obtenue n'admet pas comme cas particuliers les solutions correspondant à la levée de la dégénérescence double par l'hermiticité. Finalement, du fait de sa complexité d'utilisation, la base d'Elliott, très utile aux physiciens nucléaires parce qu'elle a un sens physique, ne semble pas très intéressante en physique atomique et est, de toute manière, inutilisable pour notre problème de construction des opérateurs à 3 particules symétriques et hermitiques comme on peut s'en rendre compte dans la 2ème partie de ce chapitre.

c) Le dernier type de méthodes conduit à une base orthonormée d'états qui sont fonctions propres des 2 invariants fondamentaux $C^2 \equiv G$ et C^3 de SU_3, de L^2 et de L_z, et d'un opérateur supplémentaire hermitique X pris dans l'algèbre enveloppante de SU_3 afin de se placer à l'intérieur d'une représentation donnée. Les valeurs propres de X servent de nombre quantique supplémentaire ; elles ne sont pas entières en général et conduisent donc à des états qui introduisent des mélanges d'irrationnalités dans les calculs d'opérateurs qui ne peuvent alors plus être faits sous forme exacte. Racah a d'ailleurs montré qu'il n'est pas possible de construire un opérateur pris dans l'algèbre enveloppante de SU_3 qui puisse à la fois servir d'opérateur de "label" et avoir des valeurs propres entières (1964).

Dans un article récent, Judd, Miller, Patera, Winternitz (1974) ont étudié cette méthode. Ils ont montré, qu'outre L^2, C^2, C^3, il existe seulement 2 opérateurs indépendants, scalaires dans R_3 (pour se placer à valeur de k donnée) pris dans l'algèbre enveloppante de

SU_3 . Ils ont déterminé ces 2 opérateurs X^3 et X^4 et utilisé X^3 ou X^4 pour caractériser les états complètement et nous nous sommes demandé quels liens ces 2 bases pouvaient avoir avec la nôtre.

2°) Bases d'états définies par Judd, Miller, Patera, Winternitz.

Deux problèmes se posent pour pouvoir comparer les bases $SU_3 \supset R_3$ précédentes avec la nôtre :

- Trouver les liens entre les générateurs de $SU_3(d+s)$ que nous avons utilisés, $(11)V_q^1$ et $(11)V_q^{+2}$, et les générateurs L_i et T_j utilisés dans l'article.

- Exprimer l'opérateur X^3 en fonction des opérateurs V_q^1 et V_q^{+2} et trouver quels sont les vecteurs propres obtenus par diagonalisation de la matrice de X^3 construite sur notre base d'états.

a) Expression des L_i et T_j en fonction des V_q^1 et V_q^{+2} .

Les auteurs montrent que si on appelle E_{ij} les opérateurs mis sous forme standard vérifiant la relation caractéristique du groupe SU_3

$$[E_{ij}, E_{k\ell}] = \delta_{jk} E_{i\ell} - \delta_{i\ell} E_{kj} \qquad (1)$$

les opérateurs L_i et T_j s'écrivent en fonction des E_{ij} :

$$L_1 = E_{12} + E_{23} \qquad L_0 = E_{11} - E_{33} \qquad L_{-1} = E_{21} + E_{32}$$

$$T_2 = E_{13} \qquad T_1 = E_{12} - E_{23} \qquad T_0 = E_{11} - 2E_{22} + E_{33}$$

$$T_{-2} = E_{31} \qquad T_{-1} = E_{21} - E_{32}$$

Les opérateurs L et T se représentent commodément sous forme matricielle en fonction des opérateurs E_{ij}

$$M(L_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad M(L_0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad M(L_{-1}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M(T_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad M(T_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad M(T_0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$M(T_{-2}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad M(T_{-1}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

forme qui permet d'obtenir facilement les relations de commutation vérifiées par les L_i et T_j dont une partie est donnée dans l'article, Ex. : $M[T_1,T_2] = M(T_1)\times M(T_2) - M(T_2)\times M(T_1)$. Les relations de commutation des V^1_q et V^{+2}_q ont été déterminées dans l'appendice II, et les analogies qui apparaissent entre celles-ci et celles vérifiées par les L_i et T_j nous montrent qu'on peut essayer de les comparer directement plutôt que de mettre des V^k_q sous la forme standard (1).

La comparaison des deux ensembles :

$$[L_1,L_{-1}] = L_0 \qquad\qquad [V^1_1,V^1_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\,V^1_0$$

$$[L_0,L_1] = L_1 \qquad \text{et} \qquad [V^1_0,V^1_1] = \frac{1}{\sqrt{10}}\,V^1_1$$

$$[L_0,L_{-1}] = -L_{-1} \qquad\qquad [V^1_0,V^1_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\,V^1_{-1}$$

montre qu'ils sont compatibles avec la correspondance

$$\boxed{\begin{aligned} V^1_0 &= \frac{1}{\sqrt{10}}\, L_0 \\ V^1_1 &= \frac{i}{\sqrt{10}}\, L_1 \\ V^1_{-1} &= \frac{i}{\sqrt{10}}\, L_{-1} \end{aligned}} \quad (2) \qquad \text{ou} \qquad \boxed{\begin{aligned} L_0 &= \sqrt{10}\, V^1_0 \\ L_1 &= -i\sqrt{10}\, V^1_1 \\ L_{-1} &= -i\sqrt{10}\, V^1_{-1} \end{aligned}} \quad (2')$$

De même la comparaison des relations :

$$[T_2, L_1] = 0 \quad \text{et} \quad [V^{+2}_2, V^1_1] = 0 \qquad [T_1, L_1] = 2T_2 \quad \text{et} \quad [V^{+2}_1, V^1_1] = -\frac{1}{\sqrt{5}}\, V^{+2}_2$$

$$[T_2, L_0] = -2T_2 \quad [V^{+2}_2, V^1_0] = -\sqrt{\frac{2}{5}}\, V^{+2}_2 \qquad [T_1, L_0] = -T_1 \quad [V^{+2}_1, V^1_0] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\, V^{+2}_1$$

$$[T_2, L_{-1}] = T_1 \quad [V^{+2}_2, V^1_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{5}} V^{+2}_1 \qquad [T_1, L_{-1}] = T_0 \quad [V^{+2}_1, V^1_{-1}] = -\sqrt{\frac{3}{10}}\, V^{+2}_0$$

$$[T_0, L_1] = 3T_1 \quad [V^{+2}_0, V^1_1] = \sqrt{\frac{3}{10}}\, V^{+2}_1 \qquad [T_0, T_{\pm 2}] = 0 \quad [V^{+2}_0, V^{+2}_{\pm 2}] = 0$$

$$[T_0, L_0] = 0 \quad [V^{+2}_0, V^1_0] = 0 \qquad [T_0, T_{\pm 1}] = \pm 3L_{\pm 1} \quad [V^{+2}_0, V^{+2}_{\pm 1}] = \pm\sqrt{\frac{3}{10}}\, V^1_{\pm 1}$$

$$[T_0, L_{-1}] = -3T_{-1} \quad [V^{+2}_0, V^1_{-1}] = -\sqrt{\frac{3}{10}}\, V^{+2}_{-1} \qquad [T_1, T_{-1}] = L_0 \quad [V^{+2}_1, V^{+2}_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\, V^1_0$$

$$[T_2, T_{-2}] = L_0 \quad [V^{+2}_2, V^{+2}_{-2}] = \sqrt{\frac{2}{5}}\, V^1_0$$

permet d'établir les correspondances :

$$\boxed{\begin{aligned} V^{+2}_0 &= \frac{1}{\sqrt{30}}\, T_0 \\ V^{+2}_{\pm 1} &= \frac{i}{\sqrt{10}}\, T_{\pm 1} \\ V^{+2}_{\pm 2} &= -\frac{1}{\sqrt{5}}\, T_{\pm 2} \end{aligned}} \quad (3) \qquad \text{soit} \qquad \boxed{\begin{aligned} T_0 &= \sqrt{30}\, V^{+2}_0 \\ T_{\pm 1} &= -i\sqrt{10}\, V^{+2}_{\pm 1} \\ T_{\pm 2} &= -\sqrt{5}\, V^{+2}_{\pm 2} \end{aligned}} \quad (3')$$

et on peut s'assurer que (2) et (3) sont en accord à un facteur près avec les produits scalaires L^2 et T^2. En effet :

$$V^1 . V^1 = \sum_q (-1)^q\, V^1_{-q}\, V^1_q = V^1_0\, V^1_0 - (V^1_{-1}\, V^1_1 + V^1_1\, V^1_{-1})$$

$$V^{+2} . V^{+2} = \sum_q (-1)^q\, V^{+2}_{-q} V^{+2}_q = V^{+2}_0 V^{+2}_0 - (V^{+2}_{-1} V^{+2}_1 + V^{+2}_1 V^{+2}_{-1}) + (V^{+2}_{-2} V^{+2}_2 + V^{+2}_2 V^{+2}_{-2})$$

et en remplaçant les V_q^k par leur expression en fonction des L_q et T_q (2) et (3) on obtient :

$$V^1 . V^1 = \frac{1}{10} \left[L_0^2 + L_{-1} L_1 + L_1 L_{-1} \right]$$

$$V^{+2} . V^{+2} = \frac{1}{5} \left[(T_{-2} T_2 + T_2 T_{-2}) + \frac{1}{2} (T_{-1} T_1 + T_1 T_{-1}) + \frac{1}{6} T_0^2 \right] .$$

On retrouve bien les expressions des produits scalaires L^2 et T^2 donnés dans l'article et on a

$$\boxed{\begin{array}{c} V^1 . V^1 = \frac{1}{10} L^2 \\ V^{+2} . V^{+2} = \frac{1}{5} T^2 \end{array}}$$

b) Expression de l'invariant X^3 et de ses éléments de matrice.

L'expression de l'invariant X^3 est donnée dans l'article en fonction des L_q et T_q

$$\begin{aligned} X^3 = {} & 3 (L_1 T_{-2} L_1 + L_{-1} T_2 L_{-1}) \\ & + \frac{3}{2} (L_{-1} T_1 L_0 + L_0 T_1 L_{-1} + L_1 T_{-1} L_0 + L_0 T_{-1} L_1) \\ & - \frac{1}{2} (L_1 T_0 L_{-1} + L_{-1} T_0 L_1) \\ & + L_0 T_0 L_0 \quad . \end{aligned}$$

En fonction des V_q^k cette expression devient :

$$\begin{aligned} X^3 = {} & 30\sqrt{5} \left[V_1^1 \, V_{-2}^{+2} \, V_1^1 + V_{-1}^1 \, V_2^{+2} \, V_{-1}^1 \right] \\ & - 15\sqrt{10} \left[V_{-1}^1 \, V_1^{+2} \, V_0^1 + V_0^1 \, V_1^{+2} \, V_{-1}^1 + V_1^1 \, V_{-1}^{+2} \, V_0^1 + V_0^1 \, V_{-1}^{+2} \, V_1^1 \right] \\ & + 5\sqrt{30} \left[V_1^1 \, V_0^{+2} \, V_{-1}^1 + V_{-1}^1 \, V_0^{+2} \, V_1^1 \right] \qquad (4) \\ & + 10\sqrt{30} \left[V_0^1 \, V_0^{+2} \, V_0^1 \right] \quad . \end{aligned}$$

Ce développement fait penser à une forme tensorielle du type

$$\{(V^1\ V^{+2})^k\ V^1\}^{k'}_0 \quad .$$

Or on sait que $X^{(3)}$ est un scalaire dans R_3, donc si cette forme existe on a $k'=0$ et $k=1$. L'expression de $\{(V^1\ V^{+2})^1\ V^1\}^0$ en fonction des triades $V^1_q\ V^{+2}_{q'}\ V^1_{q''}$ s'écrit :

$$\{(V^1\ V^{+2})^1\ V^1\}^0 = \sum_{qq'q''} (1q2q'|1-q'')(1-q''1q''|00)\ V^1_q\ V^{+2}_{q'}\ V^1_{q''} \quad \text{soit}$$

$$\{(V^1\ V^{+2})^1\ V^1\}^0 = \sum_{qq'q''} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ q & q' & q'' \end{pmatrix} V^1_q\ V^{+2}_{q'}\ V^1_{q''} \quad .$$

On obtient le développement :

$$\begin{aligned}\{(V^1\ V^{+2})^1\ V^1\}^0 = {} & \frac{1}{\sqrt{5}} [V^1_1\ V^{+2}_{-2}\ V^1_1 + V^1_{-1}\ V^{+2}_2\ V^1_{-1}] \\ & - \frac{1}{\sqrt{10}} [V^1_{-1}\ V^{+2}_1\ V^1_0 + V^1_0\ V^{+2}_1\ V^1_{-1} + V^1_1\ V^{+2}_{-1}\ V^1_0 + V^1_0\ V^{+2}_{-1}\ V^1_1] \\ & + \frac{1}{\sqrt{30}} [V^1_1\ V^{+2}_0\ V^1_{-1} + V^1_{-1}\ V^{+2}_0\ V^1_1] \qquad (5) \\ & + \sqrt{\frac{2}{15}} [V^1_0\ V^{+2}_0\ V^1_0] \quad .\end{aligned}$$

La comparaison des développements (5) et (4) montre qu'ils sont proportionnels et que l'opérateur X^3 se met sous la forme tensorielle très simple

$$\boxed{X^3 = 150\ \{(V^1\ V^{+2})^1\ V^1\}^0_0} \qquad (6)$$

On démontre facilement que :

$$\langle \lambda\tau kq | (\{V^1\ V^{+2}\}^1\ V^1)^0_0 \mid \lambda\tau' kq\rangle = \frac{1}{10} k(k+1) \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ k & k & k \end{Bmatrix} \langle \lambda\tau k \| V^{+2} \| \lambda\tau' k\rangle$$

ce qui donne pour les éléments de matrice de X^3 la formule

$$\boxed{\langle \lambda\tau kq | X^3 | \lambda\tau' kq\rangle = 15k(k+1) \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ k & k & k \end{Bmatrix} \langle \lambda\tau k \| V^{+2} \| \lambda\tau' k\rangle} \quad . \qquad (7)$$

Considérons par exemple les cas $[51]2$ et $[51]3$ ou en notation d'Elliott $(41)2$ et $(41)3$.

Les éléments de matrice réduits de l'opérateur V^{+2} pour la représentation (41) sont donnés dans les tableaux des résultats. On trouve

$$\langle (41)2 \| V^{+2} \| (41)2 \rangle = 3\sqrt{21}/7$$

$$\langle (41)3 \| V^{+2} \| (41)3 \rangle = 2\sqrt{14}/5$$

ce qui donne

$$\langle (41)2 \| X^3 \| (41)2 \rangle = 15 \times 2 \times 3 \times \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{Bmatrix} \frac{3\sqrt{21}}{7} = 27$$

$$\langle (41)3 \| X^3 \| (41)3 \rangle = 15 \times 3 \times 4 \times \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 3 \end{Bmatrix} \frac{2\sqrt{14}}{5} = 36$$

valeurs en accord avec celles publiées dans l'article.

c) Etude de la base obtenue par diagonalisation de X^3 .

La formule (7) qui donne les éléments de matrice de X^3 montre que, pour une valeur de k donnée, caractériser les états par les valeurs propres de X^3 est équivalent à choisir une base d'états qui diagonalisent la matrice de V^{+2} dans le sous-espace considéré $(\lambda)\tau k$.

- Considérons le cas $(22)0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+$

La matrice de V^{+2} , en utilisant les états $(22)^+$ et $(22)2^-$ précédemment définis, a la forme :

V^{+2}	0^+	2^+	2^-	3^-	4^+
0^+	0	0	X	0	0
2^+	0	0	X	X	0
2^-	X	X	0	0	X
3^-	0	X	0	0	X
4^+	0	0	X	X	0

.

Les états qui correspondent à V^{+2} diagonal dans le sous-espace $k=2$ ne sont donc pas ceux-ci. Dans ce cas particulier ils s'en déduisent facilement

$$(22)2\,{}_{2'} \text{ de l'article } = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(22)2^{+} \pm (22)2^{-}\right]$$

mais on peut voir déjà que les états définis par la diagonalisation de X^3 ne sont pas d'"hermiticité" définie.

- Considérons les cas $(25)1,2,3,3',4\ldots$ et $(52)1,2,\ldots$.

On a vu que l'hermiticité permet de définir les états $(25+52)1^{-},2^{+},3^{-},3^{+},4^{+}\ldots$ et $(25-52)1^{+},2^{-},3^{+},3^{-},4^{-}\ldots$ et d'en déduire les états $(25)1,2,3,3',4..$et $(52)1,2,3,3',4\ldots$ qui donnent pour V^{+2} en se limitant à la sous-matrice $k=3$:

V^{+2}	$\ldots.(25)3$	$(25)3'\ldots.$	
$(25)3$	$\frac{3\sqrt{14}}{4}$	$\frac{-7\sqrt{330}}{60}$	X
$(25)3'$	$\frac{-7\sqrt{330}}{60}$	$\frac{1\sqrt{14}}{4}$	
$\vdots$			
	X		X

On voit qu'ici les états $[25]3,3'$ correspondant à la diagonalisation de X^3 ne sont pas du tout les mêmes puisqu'ils correspondent à diagonaliser cette sous-matrice. On trouve pour les valeurs propres de V^{+2} les expressions :

V^{+2}	$[25]3$	$[25]3'$
$[25]3$	$\frac{\sqrt{14}}{2}\left[1+\sqrt{\frac{23}{15}}\right]$	0
$[25]3'$	0	$\frac{\sqrt{14}}{2}\left[1-\sqrt{\frac{23}{15}}\right]$

.

Les valeurs propres obtenues pour X^3 sont bien en accord avec les valeurs propres 100,723 et -10,723 données dans l'article

$$\frac{\sqrt{14}}{2}\left|1\pm\sqrt{\frac{23}{15}}\right| \quad 15\times 3\times 4\times\begin{Bmatrix}2 & 1 & 1\\ 3 & 3 & 3\end{Bmatrix} = 45\left|1\pm\sqrt{\frac{23}{15}}\right| = \begin{matrix}100,7225....\\ -10,7225\ .\end{matrix}$$

Les états $[25]3$ et $3'$ ainsi définis donnent donc pour V^{+2} des mélanges d'irrationnalités alors qu'il n'en est pas de même avec les états $(25)3,3'$ obtenus à partir des états $(25\pm 52)3^{\pm}$ que nous avons définis.

En résumé, on peut dire que si le choix de l'invariant X^3 comme opérateur de "label" des états $SU_3\supset R_3$ ou, ce qui revient au même, le choix d'une base telle que le générateur V^{+2} de SU_3 soit diagonal dans les sous-espaces dégénérés en k a l'avantage de caractériser simplement les états, il a l'inconvénient dans notre optique de conduire à des états qui ne coïncident pas avec nos états d'"hermiticité" déterminée.

Etudions maintenant les propriétés de la base définie par la diagonalisation de l'invariant X^4 .

d) Etude de l'opérateur X^4 .

L'opérateur X^4 est donné sous la forme

$$\begin{aligned}X^4 = {} & 2T_0L_0L_0T_0 + (-T_0L_1L_{-1}T_0 + \tfrac{3}{2}T_0L_1L_0T_{-1} + \tfrac{3}{2}T_0L_0L_1T_{-1} - 6T_0L_1L_1T_{-2}\\ & + 9T_1L_{-1}L_{-1}T_1 + \tfrac{3}{2}T_1L_{-1}L_0T_0 + \tfrac{3}{2}T_1L_0L_{-1}T_0 - \tfrac{3}{2}T_1L_{-1}L_1T_{-1} + 3T_1L_0L_0T_{-1}\\ & - \tfrac{3}{2}T_1L_1L_{-1}T_{-1} + 9T_1L_1L_0T_{-2} + 9T_1L_0L_1T_{-2} - 6T_2L_{-1}L_{-1}T_0 + 9T_2L_{-1}L_0T_{-1}\\ & + 9T_2L_0L_{-1}T_{-1} + 6T_2L_{-1}L_1T_{-2} - 12T_2L_0L_0T_{-2} + 6T_2L_1L_{-1}T_{-2})\\ & + (.....)\end{aligned}$$

où (.....) représente le même développement que la parenthèse supérieure en changeant les signes des projections.

En remplaçant les L_i et T_j par leur expression en fonction des V_q^{+2} et V_q^1 on trouve comme coefficients des produits

$V_0^{+2}\ V_0^1\ V_0^1\ V_0^{+2}$ $\quad 2 \times 300$

$V_0^{+2}\ V_1^1\ V_{-1}^1\ V_0^{+2}$ $\quad 1 \times 300$

$$\left.\begin{matrix} V_0^{+2}\ V_1^1\ V_0^1\ V_{-1}^{+2} \\ V_0^{+2}\ V_0^1\ V_1^1\ V_{-1}^{+2} \\ V_1^{+2}\ V_{-1}^1\ V_0^1\ V_0^{+2} \\ V_1^{+2}\ V_0^1\ V_{-1}^1\ V_0^{+2} \end{matrix}\right\} \frac{-\sqrt{3}}{2} \times 300$$

$V_1^{+2}\ V_{-1}^1\ V_{-1}^1\ V_1^{+2}$ $\quad 3 \times 300$

$$\left.\begin{matrix} V_1^{+2}\ V_{-1}^1\ V_1^1\ V_{-1}^{+2} \\ V_1^{+2}\ V_1^1\ V_{-1}^1\ V_{-1}^{+2} \end{matrix}\right\} -\frac{1}{2} \times 300$$

$V_1^{+2}\ V_0^1\ V_0^1\ V_{-1}^{+2}$ $\quad -1 \times 300$

$$\left.\begin{matrix} V_2^{+2}\ V_{-1}^1\ V_1^1\ V_{-2}^{+2} \\ V_2^{+2}\ V_1^1\ V_{-1}^1\ V_{-2}^{+2} \end{matrix}\right\} -1 \times 300$$

$$\left.\begin{matrix} V_1^{+2}\ V_1^1\ V_0^1\ V_{-2}^{+2} \\ V_1^{+2}\ V_0^1\ V_1^1\ V_{-2}^{+2} \\ V_2^{+2}\ V_0^1\ V_{-1}^1\ V_{-1}^{+2} \end{matrix}\right\} \frac{2\sqrt{2}}{2} \times 300$$

$$\left.\begin{matrix} V_0^{+2}\ V_1^1\ V_1^1\ V_{-2}^{+2} \\ V_2^{+2}\ V_{-1}^1\ V_{-1}^1\ V_0^{+2} \end{matrix}\right\} -\sqrt{6} \times 300$$

$V_2^{+2}\ V_0^1\ V_0^1\ V_{-2}^{+2}$ $\quad -2 \times 300$

et les mêmes coefficients pour les produits de la 2ème parenthèse.

On cherche à mettre cette expression sous forme tensorielle.

Si on développe chaque terme $V_{q_1}^{+3}\ V_{q_2}^1\ V_{q_0}^1\ V_{q_4}^{+2}$ en fonction des opérateurs couplés $[\{V^{+2}\ V^1\}^k\{V^1\ V^{+2}\}^{k'}]_0^{k''}$ on trouve, tout calcul fait, que l'invariant X^4 s'écrit :

$$X^4 = -150[7\sqrt{3}\{(V^{+2}\ V^1)^1(V^1\ V^{+2})^1\}_0^0 + 7\sqrt{5}\{(V^{+2}\ V^1)^2(V^1\ V^{+2})^2\}_0^0 + 2\sqrt{7}\{(V^{+2}\ V^1)^3(V^1\ V^{+2})^3\}_0^0] \qquad (8)$$

Les éléments de matrice d'un groupe $\{(V^{+2}\ V^{1})^{K}(V^{1}\ V^{+2})^{K}\}^{0}_{0}$ sont donnés par l'expression :

$$\langle\lambda\tau kq|\{(V^{+2}\ V^{1})^{K}(V^{1}\ V^{+2})^{K}\}^{0}_{0}|\ \lambda'\tau'k'q'\rangle = \delta(\lambda,\lambda')\delta(k,k')\delta(qq')$$

$$\frac{1}{10}(-1)^{k+K}\frac{\sqrt{[K]}}{[k]} \times \sum_{\tau"k"} (-1)^{k"}\ k"(k"+1)(2k"+1)$$

$$\begin{Bmatrix} K & k" & k \\ k" & 2 & 1 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} K & k & k" \\ k" & 1 & 2 \end{Bmatrix}\langle\lambda\tau k||V^{+2}||\lambda\tau"k"\rangle\langle\lambda\tau"k"||V^{+2}||\lambda\tau'k\rangle \qquad (9)$$

et nous avons vérifié que le calcul de quelques valeurs propres de X^{4} donne bien les mêmes valeurs que celles publiées dans l'article.

α) Cas des représentations autoconjuguées.

Considérons les cas (22)0,2,2',3,4 ; les éléments de matrice $\langle(22)k||V^{+2}||(22)k'\rangle$ sont tabulés (III) ; calculons les éléments de matrice de X^{4} entre les états de base que nous avons définis. On trouve

$\langle(22)0|X^{4}|(22)0\rangle$ => K=2 $\langle|X^{4}|\rangle = -2016$

$\langle(22)2|X^{4}|(22)2\rangle$ => K=1 => $-99\sqrt{3}/2^{2}\times 5^{3}$

K=2 => $111\sqrt{5}/2^{2}\times 5^{3}$

K=3 => $-204\sqrt{7}/2\times 5^{3}\times 7$

soit au total $150\left|\frac{7\sqrt{3}\times 99\sqrt{3}}{2^{2}\times 5^{3}} - \frac{111\sqrt{5}\times 7\sqrt{5}}{2^{2}\times 5^{3}} + \frac{2\times 7\times 204}{2\times 5^{3}\times 7}\right| = -297$

$\langle(22)2|X^{4}|(22)2'\rangle = 0$

$\langle(22)2'|X^{4}|(22)2'\rangle = -1449$.

L'élément nul $\langle(22)2|X^{4}|(22)2'\rangle$ montre que l'opérateur X^{4} respecte la séparation par l'hermiticité dans le cas des représentations autoconjuguées ; ceci est dû à la forme de ses éléments de matrice qui fait

intervenir l'expression $\Sigma\langle\psi||V^{+2}||\psi''\rangle\langle\psi''||V^{+2}||\psi'\rangle$. En effet, les seuls termes non nuls de ce développement doivent verifier à la fois

$$\begin{cases}\psi \text{ et } \psi'' & \text{hermiticité opposée}\\ \psi' \text{ et } \psi'' & \text{hermiticité opposée}\end{cases}$$

donc les éléments de matrice de X^4 non nuls sont tels que ψ et ψ' sont de même hermiticité. Dans le cas d'une dégénérescence double on a directement les états $(\lambda{=}\mu)k^{\pm}$, par exemple :

X^4	$(22)2^+$	2^-
$(22)2^+$	a	0
$(22)2^-$	0	b

.

Dans le cas d'une dégénérescence supérieure on obtient par X^4 la séparation maximale que peuvent apporter les propriétés d'hermiticité, en 2 catégories d'états du type k^+ et k^-

X^4	$(\lambda{=}\mu)2^+, 2'^+$	$(\lambda{=}\mu)2^-, 2'^-, \ldots$
$(\lambda{=}\mu)2^+$ $2'^+$ ⋮	A	0
2^- $2'^-$ ⋮	0	B

et on peut choisir pour séparer les différents vecteurs $|(\lambda{=}\mu)2^{\varepsilon}\rangle$ de même hermiticité

- soit de diagonaliser X^4 effectivement
- soit de choisir arbitrairement, comme nous le faisons, un certain nombre de C.C.G. nuls.

Donc, dans le cas des représentations autoconjuguées pas plus de deux fois dégénérées en k la diagonalisation de X^4 conduit aux mêmes états $SU_3 \supset R_3$ que les nôtres.

β) Cas des représentations non autoconjuguées.

Le dernier point à étudier est le problème des représentations non autoconjuguées. X^4 conduit-il à des états (25)3,3' et (52)3,3' qui vérifient la séparation hermitique $(25 \pm 52)3^{\pm}$ ou s'en déduisent facilement ?

Les résultats du Tableau III et les formules (7), (8), (9) conduisent pour X^3 et X^4 aux matrices suivantes exprimées dans notre base :

$2X^3$	(25)3	(25)3'	(52)3	(52)3'
(25)3	135	$-3\sqrt{1155}$	0	
(25)3'	$-3\sqrt{1155}$	45		
(52)3	0		-135	$3\sqrt{1155}$
(52)3'			$3\sqrt{1155}$	-45

X^4	(25)3	(25)3'	(52)3	(52)3'
(25)3	-5454	$\pm 36\sqrt{1155}$	0	
(25)3'	$\pm 36\sqrt{1155}$	-1926		
(52)3	0			
(52)3'				

La valeur $\pm 36\sqrt{1155}$ portée dans le tableau de la matrice de X^4 n'est pas tout à fait sûre. En effet, on a vu que les matrices $\langle (25) \| V^{+2} \| (25) \rangle$ portées dans le tableau général des résultats ne sont pas complètes. Or le calcul des éléments de matrice de X^4 à l'aide de la formule (9) fait intervenir les éléments $\langle (25)5,5' \| V^{+2} \| (25)5,5' \rangle$ inconnus. Les valeurs propres de l'opérateur de Casimir permettent d'établir entre les éléments de matrices de V^{+2} des relations telles qu'on peut déterminer les éléments diagonaux de X^4 soit

$$\langle (25)3 \| X^4 \| (25)3 \rangle \quad \text{et} \quad \langle (25)3' \| X^4 \| (25)3' \rangle \ .$$

L'élément non diagonal $\langle(25)3\|X^4\|(25)3'\rangle$ a été déterminé en partie à l'aide des valeurs propres de X^4, publiées malheureusement avec 3 chiffres après la virgule seulement ; il n'est donc pas égal de façon certaine à $\pm 36\sqrt{1155}$ mais peut être à $\frac{k_1}{k_2}\sqrt{1155}$ ou $\frac{k_1}{k_2} \approx 36$. Si on admet cette valeur on remarque que pour le cas particulier traité notre base diagonalise l'opérateur $[24X^3 \pm X^4]$, propriété qui ne serait intéressante que si cette combinaison pouvait être déterminée a priori.

Comparons les cas $(22)2^+,2^-$ et $(25 \pm 52)3^\pm$.

La base $(22)2^+,2^-$ assure à X^3 et X^4 la forme

V^{+2} , X^3	2^+	2^-
2^+	0	k
2^-	k	0

X^4	2^+	2^-
2^+	a	0
2^-	0	b

On peut donc penser que X^3 est un invariant de même type d'hermiticité que V^{+2}, c'est-à-dire hermitique : ses éléments de matrice sont nuls entre des états de même "hermiticité". Par contre X^4 est un invariant de même type d'hermiticité que V^{-1}, c'est-à-dire antihermitique : ses éléments de matrice sont nuls entre des états d'"hermiticité" différente.

Donc X^3 est du type $(00)0^+$ et X^4 du type $(00)0^-$.

La base $(25 \pm 52)3^\pm$ donne pour X^3 et X^4 les formes

X^3	(25+52) 3^-	(25-52) $3'^-$	(25-52)(25+52) 3^+	(25-52)(25+52) $3'^+$
$(+)3^-$	0	0	a	k
$(-)3'^-$	0	0	k	b
$(-)3^+$	a	k	0	0
$(+)3'^+$	k	b	0	0

X^4	(25+52)(25-52) 3^-	(25+52)(25-52) $3'^-$	(25-52)(25+52) 3^+	(25-52)(25+52) $3'^+$
$(+)3^-$	a'	k'	0	0
$(-)3'^-$	k'	b'	0	0
$(-)3^+$	0	0		
$(+)3'^+$	0	0		

Nos états $(25)3,3'$ et $(52)3,3'$ forment une base B'_c et nos états $(25 \pm 52)3^{\pm}$ forment une base B_c. Ces bases sont reliées par la transformation T

$$(25+52)3^- = \frac{1}{\sqrt{2}}[(25)3 + (52)3]$$

$$(25-52)3^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}[(25)3 - (52)3]$$

$$(25+52)3'^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}[(25)3' + (52)3'] \qquad \text{soit } B_c = T\,B'_c$$

$$(25-52)3'^- = \frac{1}{\sqrt{2}}[(25)3' - (52)3']$$

On appelle B'_3 la base qui diagonalise X^3 et B_3 la base $T\,B'_3$

B'_4 " " X^4 et B_4 la base $T\,B'_4$.

On a alors avec les bases B'_3 et B_3

$X^3_{B'_3}$	$(25)3$	$3'$	$(52)3$	$3'$
$(25)3$	λ_1	0	0	0
$3'$	0	λ_2	0	0
$(52)3$	0	0	$-\lambda_1$	0
$3'$	0	0	0	$-\lambda_2$

$X^3_{B_3}$	$(25+52)3$	$(25-52)3'$	$(25-52)3$	$(25+52)3'$
$(+)3$	0	0	λ_1	0
$(-)3'$	0	0	0	λ_2
$(-)3$	λ_1	0	0	0
$(+)3'$	0	λ_2	0	0

$X^4_{B_3}$	$(+)3$	$(-)3'$	$(-)3$	$(+)3'$
$(+)3$				K'
$(-)3'$			K'	
$(-)3$		K'		
$(+)3'$	K'			

La base B_3 ne fait pas apparaître d'élément non diagonal pour X^3

mais en fait apparaître un pour X^4 . L'annulation de cet élément permet de trouver le changement de base entre B_3 et notre base B_c d'états ± .

De même la base B_4 ne fait pas apparaître d'élément non diagonal pour la matrice de X^4 mais en fait apparaître un pour X^3 . L'annulation de cet élément définit le changement de base entre B_4 et notre base B_c d'états ± .

L'indétermination des éléments de matrice $\langle(25)3||V^{+2}||(25)3'\rangle$ et $\langle(52)3||V^{+2}||(52)3'\rangle$ égaux à $\pm \frac{k_1}{k_2}\sqrt{1155} = (\pm\ 36\sqrt{1155}\ ?)$ nous a empêché de vérifier complètement l'étude présentée dans ce dernier paragraphe et d'expliciter complètement les différents changements de base.

En résumé de l'étude de l'opérateur de X^4 on peut dire qu'on a montré que cet invariant conduit dans le cas des représentations autoconjuguées pas plus de deux fois dégénérées en k aux mêmes états d'"hermiticité" donnée que les nôtres. Dans le cas des représentations non autoconjuguées le lien est plus complexe et nécessite pour être mis en évidence le calcul des éléments de matrices de l'invariant X^3 .

3°) Conclusions de la discussion des états $SU_3 \supset R_3$.

A travers cette discussion on peut s'apercevoir de deux choses :

a) On peut trouver facilement une base d'états qui permet de faire les calculs sous forme exacte. Ainsi, les déterminations arbitraires de C.C.G. dans les cas dégénérés définissent facilement une base complète ne mélangeant pas les irrationnalités. Cependant, ces arbitraires

entraînent d'une part que les C.C.G. n'ont pas de lien théorique suffisant entre eux et, d'autre part, introduisent dans les intermédiaires de calcul des nombres très grands qui peuvent finalement empêcher de mener ceux-ci à leur terme.

b) La méthode des invariants définit des bases complètes sans aucun arbitraire qui permet donc, en principe, toute étude théorique sur les propriétés des coefficients angulaires. Malheureusement, dans ce cas, les calculs ne peuvent plus être menés sous la forme exacte qui seule conduit à des résultats numériques ou à des équations sans ambiguïté.

Entre ces deux extrêmes et tout en utilisant la première méthode, nous avons montré que l'exploitation des propriétés d'hermiticité des opérateurs couplés permet de diminuer l'arbitraire de détermination des C.C.G. et de résoudre complètement, sans mélange d'irrationnalité, les cas de dégénérescence interne double aussi bien dans le cas des représentations autoconjuguées que dans le cas des représentations non autoconjuguées et nous allons voir, dans la seconde partie de ce chapitre, comment les C.C.G. ainsi définis permettent de construire plus facilement les opérateurs à 3 particules scalaires symétriques et hermitiques.

2ème partie : Classification des opérateurs effectifs à 3 particules agissant dans $(d + s)^n$.

A) Classification formelle.

On sait qu'on veut exprimer à partir des opérateurs monoélectroniques classés $(11)V^{1^-,2^+}$ et $(22)V^{0^+,2^+,2^-,3^-,4^+}$ les opérateurs effectifs à 3 corps qui interviennent dans les corrections de second ordre des interactions électrostatiques, c'est-à-dire dans l'expression Ω donnée au chapitre I. On veut donc construire des opérateurs à 3 particules possédant des propriétés de transformation bien définies dans les opérations des groupes SU_3 et R_3 qui s'écrivent à l'aide des C.C.G. déterminés précédemment :

$$[((\lambda_1\lambda_2)\alpha'\lambda',\lambda_3\tau_3)\alpha\lambda\tau]\ T^0_{ij\ell} = \sum_{\tau_1 k_1,\tau_2 k_2,\tau_3 k_3,\tau'} \langle \lambda_1\tau_1 k_1+\lambda_2\tau_2 k_2 | \alpha'\lambda'\tau' k_3\rangle$$

$$\langle \alpha'\lambda'\tau' k_3+\lambda_3\tau_3 k_3 | \alpha\lambda\tau 0\rangle \left\{[(\lambda_1\tau_1)V_i^{k_1}(\lambda_2\tau_2)V_j^{k_2}]^{k_3}(\lambda_3\tau_3)V_\ell^{k_3}\right\}^0 .$$

On sait que la définition de l'hermiticité d'un opérateur tensoriel de rang nul coïncide avec la définition normale de l'hermiticité d'un opérateur linéaire ; les interactions électrostatiques qu'on veut exprimer ici correspondent à des observables (corrections à l'énergie électrostatique du 1er ordre) ; elles s'expriment donc en fonction d'opérateurs hermitiques seulement, $T^{0^+}_{ij\ell}$, développés sur des produits

$V_i^{\varepsilon_1 k_1} V_j^{\varepsilon_2 k_2} V_\ell^{\varepsilon_3 k_3}$, où les ε_i correspondent à + ou - , vérifiant $\pi_i \varepsilon_i = +$. On a vu que les différents C.C.G. calculés, $\langle \lambda_1 \tau_1 k_1^{\pm} + \lambda_2 \tau_2 k_2^{\pm} \mid \alpha'(\lambda\mu)'\tau' k_3 \rangle$, intervenant dans l'expression ci-dessus des opérateurs classés à 3 particules, sont tels qu'ils permettent de définir des opérateurs biélectroniques $[(\lambda\mu)' \pm (\mu\lambda)']k_3^{\pm}$.

De même on peut construire à partir des C.C.G. du type $\langle(\lambda\mu)'\tau' k_3 + \lambda_3 \tau_3 k_3^{\pm} \mid (\lambda\mu)0\rangle$ des C.C.G. $\langle(\lambda\mu' + \mu\lambda')k_3^{\pm} + \lambda_3 \tau_3 k_3^{\pm} \mid (\lambda\mu \pm \mu\lambda)0^{\pm}\rangle$ ce qui permet alors de séparer dans les opérateurs $T^0_{ij\ell}$ les parties hermitiques et antihermitiques.

Les opérateurs cherchés doivent de plus être symétriques et sont, en fait, des combinaisons linéaires des $T^{0+}_{ij\ell}$ classés et hermitiques précédents.

Un premier point est de déterminer le nombre et le type d'opérateurs à construire et nous examinons successivement le problème des opérateurs symétriques et celui des opérateurs symétriques hermitiques.

1°) Nombre d'opérateurs symétriques.

On a vu au chapitre I que si l'ensemble des opérateurs monoélectroniques se transforment comme les représentations $[(11)+(22)]$ de SU_3 (notation d'Elliott), les opérateurs à 3 particules symétriques sont ceux qui interviennent dans l'expression du pléthysme :

$$[(11)+(22)]\otimes\{3\} = (11)\otimes\{3\} + (22)\otimes\{3\} + [(11)\otimes\{2\}](22) + [(22)\otimes\{2\}](11) \qquad (1)$$

Le calcul complet, donné dans l'appendice I, conduit au résultat d'ensemble :

$$[(11)+(22)]\otimes\{3\} = 5\times(00) + 11\times(11) + 22\times(22) + \begin{matrix}9\times(30)\\ 9\times(03)\end{matrix} + 17\times(33) + \begin{matrix}12\times(41)\\ 12\times(14)\end{matrix}$$

$$+ \begin{matrix}8\times(44)\\ 8\times(25)\end{matrix} + \begin{matrix}8\times(52)\\ \end{matrix} + 2\times(55) + \begin{matrix}6\times(60)\\ 6\times(06)\end{matrix} + \begin{matrix}3\times(63)\\ 3\times(36)\end{matrix} + (66) + \begin{matrix}2\times(71)\\ 2\times(17)\end{matrix} + \begin{matrix}(82)\\ (28)\end{matrix}$$

où les représentations pouvant donner un état S sont :

$$5\times(00)0 \quad 22\times(22)0 \quad 8\times(44)0 \quad \begin{matrix}6\times(60)0\\ (06)\end{matrix} \quad \begin{matrix}(82)0\\ (28)\end{matrix} \quad .$$

D'après l'expression développée du pléthysme 49 opérateurs scalaires symétriques peuvent donc être construits à partir des opérateurs $T^0_{ij\ell}$ précédents.

En fait, à chacun des 4 termes de l'expression (1) correspond un groupe d'opérateurs indépendants puisqu'ils sont construits à partir de 4 produits distincts de représentations de SU_3 : (11)(11)(11), (22)(22)(22), (11)(11)(22), (22)(22)(11) .

Il est donc plus intéressant de considérer le développement de chaque terme. Les calculs de l'appendice I montrent qu'on a :

$$[(11)\otimes\{2\}](22) = (00)+3(11)+\begin{matrix}2(30)\\ 2(03)\end{matrix}+6(22)+\begin{matrix}3(41)\\ 3(14)\end{matrix}+\begin{matrix}(60)\\ (06)\end{matrix}+3(33)+\begin{matrix}(52)\\ (25)\end{matrix}+(44)$$

$$[(22)\otimes\{2\}](11) = (00)+5(11)+\begin{matrix}4(30)\\ 4(03)\end{matrix}+8(22)+\begin{matrix}6(41)\\ (14)\end{matrix}+7(33)+\begin{matrix}(71)\\ (17)\end{matrix}+\begin{matrix}2(60)\\ 2(06)\end{matrix}+\begin{matrix}4(52)\\ (25)\end{matrix}$$

$$+3(44)+\begin{matrix}(63)\\ (36)\end{matrix}+(55)$$

$$[(11)\otimes\{3\}] = (00)+(11)+(22)+(33)+\begin{matrix}(30)\\ (03)\end{matrix}$$

$$[(22)\otimes\{3\}] = 2(00)+7(22)+4(44)+\begin{matrix}3(60)\\ 3(06)\end{matrix}+(66)+\begin{matrix}(82)\\ (28)\end{matrix}+2(11)+\begin{matrix}2(30)\\ (03)\end{matrix}+6(33)+\begin{matrix}3(41)\\ 3(14)\end{matrix}$$

$$+(55)+\begin{matrix}2(63)\\ 2(36)\end{matrix}+\begin{matrix}(71)\\ (17)\end{matrix} \quad .$$

Pour chaque terme les opérateurs scalaires symétriques sont donc :

$[(11)\otimes\{2\}](22) \Rightarrow (00)+6(22)+(60)+(44)+(06)$ 10 opérateurs

$[(22)\otimes\{2\}](11) \Rightarrow (00)+8(22)+2(60)+3(44)+2(06)$ 16 opérateurs

$[(11)\otimes\{3\}] \Rightarrow (00)+(22)$ 2 opérateurs

$[(22)\otimes\{3\}] \Rightarrow 2(00)+7(22)+4(44)+3(60)+(66)+(82)+3(06)+(28)$ 22 opérateurs .

2°) Opérateurs symétriques et hermitiques.

Parmi les opérateurs symétriques précédents, seuls les opérateurs hermitiques nous intéressent. On sait d'autre part que les opérateurs monoélectroniques classés sont d'hermiticité déterminée $(11)V^{1^-2^+}$, $(22)V^{0^+,2^+,2^-,3^-,4^+}$. On peut donc chercher le nombre d'opérateurs à 3 particules, symétriques, hermitiques et scalaires en raisonnant sur les composantes $\lambda_1 V^{k_1^\pm} \times \lambda_2 V^{k_2^\pm} \times \lambda_3 V^{k_3^\pm}$ qui peuvent intervenir dans les 4 sortes de produits symétriques. Nous notons ces triades $(k_1^\pm\, k_2^\pm\, k_3^\pm)$. Les triades hermitiques sont du type $(+++)$, $(+--)$ et les triades intervenant dans le développement d'un opérateur scalaire sont celles dont les valeurs $k_1\, k_2\, k_3$ vérifient la relation triangulaire.

a) Cas $[(11)\otimes\{2\}](22)$.

Ces opérateurs sont construits sur des produits $(11)V^{k_1}(11)V^{k_2}(22)V^{k_3}$ symétriques en $(11)k_1(11)k_2$. Si k_1 est différent de k_2 on ne doit considérer que la combinaison symétrique de $k_1\, k_2\, k_3$ et

$k_2\ k_1\ k_3$. Les cas possibles sont alors les suivants :

$(11)k_1$	$(11)k_2$	$(22)k_3$	
1^-	1^-	0^+	
2^+	2^+	0^+	
1^-	1^-	2^+	
2^+	2^+	2^+	
1^-	2^+	2^-	Combinaison symétrique seulement
2^+	1^-		
1^-	2^+	3^-	Combinaison symétrique seulement
2^+	1^-		
2^+	2^+	4^+	

On doit donc pouvoir construire 7 opérateurs symétriques, scalaires, hermitiques du type $(11)(11)(22)$.

b) Cas $[(22)\otimes\{2\}](11)$.

On a de même les cas suivants :

$(22)k_1$	$(22)k_2$	$(11)k_3$	
2^+	2^-	1^-	
2^-	2^+		
2^+	3^-	1^-	
3^-	2^+		
3^-	4^+	1^-	
4^+	3^-		
0^+	2^+	2^+	
2^+	0^+		
2^+	2^+	2^+	
2^+	4^+	2^+	
4^+	2^+		
2^-	2^-	2^+	
2^-	3^-	2^+	
3^-	2^-		soit 10 opérateurs du type $(22)(22)(11)$.
3^-	3^-	2^+	
4^+	4^+	2^+	

c) Cas $[(11)\otimes\{3\}]$.

Les produits doivent être complètement symétriques pour toute permutation de $k_1k_2k_3$.

$(11)k_1$	$(11)k_2$	$(11)k_3$	
1^-	2^+	1^-	Combinaison symétrique seulement.
2^+	1^-	1^-	
1^-	1^-	2^+	
2^+	2^+	2^+	

soit 2 opérateurs du type $(11)(11)(11)$

d) Cas $[(22)\otimes\{3\}]$.

$(22)k_1$	$(22)k_2$	$(22)k_3$	
0^+	0^+	0^+	
2^+	2^+	0^+	la combinaison symétrique
0^+	2^+	2^+	
2^+	0^+	2^+	
2^-	2^-	0^+	"
0^+	2^-	2^-	
2^-	0^+	2^-	
3^-	3^-	0^+	"
0^+	3^-	3^-	
3^-	0^+	3^-	
4^+	4^+	0^+	"
0^+	4^+	4^+	
4^+	0^+	4^+	
2^+	2^+	2^+	
2^+	4^+	2^+	"
4^+	2^+	2^+	
2^+	2^+	4^+	
2^-	2^-	2^+	"
2^+	2^-	2^-	
2^-	2^+	2^-	

$(22)k_1$	$(22)k_2$	$(22)k_3$	
2^-	3^-	2^+	la combinaison symétrique
3^-	2^-	2^+	
2^+	3^-	2^-	
3^-	2^+	2^-	
2^+	2^-	3^-	
2^-	2^+	3^-	
3^-	3^-	2^+	"
2^+	3^-	3^-	
3^-	2^+	3^-	
4^+	4^+	2^+	"
2^+	4^+	4^+	
4^+	2^+	4^+	
2^-	4^+	2^-	"
4^+	2^-	2^-	
2^-	2^-	4^+	
3^-	4^+	2^-	"
4^+	3^-	2^-	
2^-	4^+	3^-	
4^+	2^-	3^-	
2^-	3^-	4^+	
3^-	2^-	4^+	
3^-	4^+	3^-	"
4^+	3^-	3^-	
3^-	3^-	4^+	
4^+	4^+	4^+	

Soit 15 opérateurs symétriques, scalaires, hermitiques du type $(22)(22)(22)$.

En résumé de la classification formelle on trouve qu'on doit pouvoir déterminer à partir des opérateurs classés $T^{O}_{ij\ell}$:

- 7 opérateurs $A_i^{O^+}$ hermitiques et symétriques du type $[(11)\otimes\{2\}](22)$

-10 opérateurs $B_i^{O^+}$ " " " $[(22)\otimes\{2\}](11)$

- 2 opérateurs $C_i^{O^+}$ " " " $[(11)\otimes\{3\}]$

-15 opérateurs $D_i^{O^+}$ " " " $[(22)\otimes\{3\}]$

B) Classification explicite des opérateurs.

I) Cas des opérateurs $[(11)\otimes\{2\}](22)$.

Parmi les 10 opérateurs symétriques correspondant à l'expression $[(11)\otimes\{2\}](22)$ on sait que 3 sont antihermitiques et ne sont pas à considérer. La forme $(11)\otimes\{2\}$ montre que les opérateurs à 3 particules cherchés doivent être construits à partir d'opérateurs biélectroniques $[(11)(11)]\alpha\lambda\tau k$ eux-mêmes symétriques. On a vu à propos de la détermination des C.C.G. du type $\langle(11)\tau_1 k_1+(11)\tau_2 k_2|\alpha\lambda\tau k\rangle$ qu'on a séparé facilement les solutions correspondant aux représentations symétriques λ_s d'une part et celles correspondant aux représentations antisymétriques λ_a d'autre part. Les C.C.G. donnés dans le tableau I conduisent donc directement aux représentations contenues dans le pléthysme $(11)\otimes\{2\}$ soit $(11)\otimes\{2\} = (00)_s,0^+$

$$(22)_s,0^+\ 2^+\ 2^-\ 3^-\ 4^+$$

$$(11)_s,1^-\ 2^+ \quad .$$

Le couplage avec le troisième opérateur $(22)V^{k_3}$ entraîne les différents cas possibles

$[(11)\otimes\{2\}](00)_s,\times(22) \Rightarrow (22)_s0^+$

$(22)_s,\times(22) \Rightarrow (00)_s0^+ , (22)_s0^+ , (06+60)_s0^+ , (44)_s0^+$

$$(22)'_s0^+ , (06-60)_s0^-$$

$$(22)_a0^-$$

$(11)_s,\times(22) \Rightarrow (22)0^+$

$$(22)'0^- \quad .$$

On voit qu'une fois enlevés les cas antihermitiques on trouve bien 7 opérateurs possibles $[(11)\otimes\{2\}](22)$ comme précédemment. La notation $(\lambda'\mu')_{s'}$ exprime le fait que les C.C.G. $\langle(11)\tau_1 k_1+(11)\tau_2 k_2|\alpha'(\lambda'\mu')_{s'},\tau' k'\rangle$ permettent de construire des opérateurs biélectroniques symétriques en k_1, k_2 formant une base pour la représentation $(\lambda'\mu')_{s'}$ symétrique appartenant au pléthysme $(11)\otimes\{2\}$, alors que la notation $(\lambda\mu)_s$ exprime le fait que les C.C.G. précédents $\langle(11)+(11)|\alpha'\lambda'_{s'},\rangle$ et les C.C.G. $\langle\lambda'_{s'},+(22)..|\alpha\lambda_s\tau 0\rangle$ permettent de construire des opérateurs à 3 particules symétriques en $k_1\ k_2\ k_3$ formant une base pour la représentation $(\lambda\mu)_s$ symétrique appartenant au terme $[(11)\otimes\{2\}](22)$ du pléthysme $[(11)+(22)]\otimes\{3\}$.

Les considérations précédentes montrent donc que les expressions

$$\sum_{\substack{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \\ \tau' \\ \tau_3 k_3}} \langle(11)\tau_1 k_1+(11)\tau_2 k_2|(\lambda=\mu)_{s'},\tau' k_3^{\pm}\rangle \times \langle(\lambda=\mu)_{s'},\tau' k_3^{\pm}+(22)\tau_3 k_3|(\lambda=\mu)0^+\rangle \left\{[(11)V^{k_1}(11)V^{k_2}]^{k_3}(22)\tau_3 V^{k_3}\right\}^0 ,$$

où les C.C.G. nécessaires sont tabulés, définissent directement des opérateurs symétriques et hermitiques à 3 particules. Il en est de même de l'expression $\Sigma\langle(11)+(11)|(\lambda=\mu)_{s'},k'^{\pm}\rangle\langle(\lambda=\mu)_{s'},k'^{\pm}+(22)k_3|(06+60)_s 0^+\rangle$ ..... où le premier C.C.G. est tabulé et où le second est la combinaison hermitique

$$\langle(\lambda'=\mu')+(22)|(06+60)0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle(\lambda'=\mu')+(22)|(06)0\rangle + \langle(\lambda'=\mu')+(22)|(60)0\rangle\right] .$$

Les 7 opérateurs sont donnés finalement par la formule

$$\left\{[(11)\otimes\{2\}]\alpha'\lambda'_{s'},(22)\right\}\alpha\lambda_s\tau\ A^{0^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \tau'} \langle(11)\tau_1 k_1^{\pm}+(11)\tau_2 k_2^{\pm}|\alpha'\lambda'_{s'},\tau' k_3^{\pm}\rangle \times$$

$$\langle\alpha'\lambda'_{s'},\tau' k_3^{\pm}+(22)\tau_3 k_3^{\pm}|(\lambda\mu+\mu\lambda)_s 0^+\rangle\left\{[(11)V_i^{k_1^{\pm}}(11)V_j^{k_2^{\pm}}]^{k_3}(22)\tau_3 V_\ell^{k_3^{\pm}}\right\}^0$$

combinaisons linéaires dont on sait calculer les coefficients à l'aide des tableaux [I] et [5] .

A titre d'exemple,

considérons les opérateurs $\{[(11)\otimes\{2\}](22)_s\times(22)\}A^{0^+}_{i=3,\ldots 7}$.

Les cas possibles sont $(22)\times(22) \Rightarrow (00)_s 0^+, (22)0^+, (22)'0^+,$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(06+60)0^+, (44)0^+ .$$

La formule précédente permet d'écrire que les 5 combinaisons cherchées sont les produits de chacune des 5 colonnes, où sont portés les C.C.G.

$\langle(22)\tau' k_3+(22)\tau_3 k_3|(\lambda\mu+\mu\lambda)_s 0^+\rangle$, par la partie correspondant au couplage $(11)\otimes\{2\} \Rightarrow (22)_s$ et exprimée à l'aide des C.C.G.

$\langle(11)k_1+(11)k_2|(22)\tau' k_3^{\pm}\rangle$

$(44)_s 0^+$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(06+60)0^+$	$(22)'0^+$	$(22)0^+$	$(00)0^+$	$(11)\otimes\{2\} \Rightarrow (22)_s$
$-\frac{1\sqrt{70}}{15}$	$\frac{4\sqrt{42}}{45}$	$2\sqrt{2}/5$	0	$-1\sqrt{3}/9$	$\left\{\left[-\frac{1\sqrt{10}}{4}((11)v^{1^-}(11)v^{1^-})^{0^+}-\frac{1\sqrt{6}}{4}((11)v^{2^+}(11)v^{2^+})^{0^+}\right]\times(22)v^{0^+}\right\}^{0^+}$
$-\frac{5\sqrt{14}}{42}$	$-5\sqrt{210}/126$	0	$1\sqrt{14}/7$	$-1\sqrt{15}/9$	$\left\{\left[\frac{\sqrt{70}}{10}(v^{1^-}\ v^{1^-})^{0^+}-\frac{\sqrt{30}}{10}(v^{2^+}\ v^{2^+})^{2^+}\right]\times(22)v^{2^+}\right\}^{0^+}$
$-\frac{1\sqrt{14}}{6}$	$1\sqrt{210}/90$	$-1\sqrt{10}/5$	0	$1\sqrt{15}/9$	$\left\{\left[-\frac{\sqrt{2}}{2}(v^{1^-}\ v^{2^+})^{2^-}+\frac{\sqrt{2}}{2}(v^{2^+}\ v^{1^-})^{2^-}\right]\times(22)v^{2^-}\right\}^{0^+}$
$-\frac{1\sqrt{10}}{12}$	$-2\sqrt{6}/9$	$1\sqrt{14}/8$	$-1\sqrt{10}/8$	$1\sqrt{21}/9$	$\left\{\left[\frac{\sqrt{2}}{2}(v^{1^-}\ v^{2^+})^{3^-}+\frac{\sqrt{2}}{2}(v^{2^+}\ v^{1^-})^{3^-}\right]\times(22)v^{3^-}\right\}^{0^+}$
$-\frac{3\sqrt{70}}{140}$	$-2\sqrt{42}/105$	$-7\sqrt{2}/40$	$-5\sqrt{70}/56$	$-1\sqrt{3}/3$	$\left\{\left[1\ (v^{2^+}\ v^{2^+})^{4^+}\right]\times(22)v^{4^+}\right\}^{0^+}$

On trouve, en développant, l'expression des 5 opérateurs $A_3^{0^+}$ .... $A_7^{0^+}$.

Finalement les 7 opérateurs cherchés sont exprimés en fonction des 9 triades $\{[(11)^{\pm k_1}(11)^{\pm k_2}]^{k_3}(22)V^{\pm k_3}\}^{0^+}$ ou, de façon abrégée, $(k_1^{\pm}\ k_2^{\pm}\ k_3^{\pm})$; on vérifie que les coefficients des triades $(k_1\ k_2\ k_3)$ et $(k_2\ k_1\ k_3)$ sont égaux ou opposés ; en effet on sait que seules les combinaisons symétriques $(k_1\ k_2\ k_3)_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[(k_1\ k_2\ k_3) + (-1)^{k_1+k_2+k_3}(k_2\ k_1\ k_3)]$ interviennent et on a le tableau récapitulatif II-1 .

II. Cas des opérateurs $[(22)\otimes\{2\}](11)$.

Les résultats des C.C.G. $\langle(22)+(22)|\alpha\lambda\tau k\rangle$ permettent d'exprimer les opérateurs à 2 particules symétriques appartenant au pléthysme $(22)\otimes\{2\}$ et les différents cas sont alors

$$
\begin{aligned}
(22)\otimes\{2\} = {} & (00)_s, 0^+ \\
& (22)_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+ \\
& (22)'_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+ \\
& (06+60)_s, 0^+, 2^+, 4^+ \\
& (06-60)_s, 0^-, 2^-, 4^- \\
& (44)_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4_a^+, 4_b^+, 4^- \\
& (11)_s, 1^-, 2^+ \\
& (14+41)_s, 1^-, 2^+, 3^-, 4^+ \\
& (14-41)_s, 1^+, 2^-, 3^+, 4^- \\
& (33)_s, 1^-, 2^+, 3^-, 3^+, 4^+, 4^- \quad .
\end{aligned}
$$

Lorsqu'on couple le 3ème opérateur $(11)V^{k_3^{\pm}}$ deux cas sont à considérer :

$\{[[(11)\otimes\{2\}]\lambda'_s \times (22)\}\lambda 0^+$

$[\lambda'_s \times (22)]\lambda 0^+$	$(1^-1^-0^+)$	$(1^-1^-2^+)$	$(1^-2^+2^-)$ $-(2^+1^-2^-)$	$(1^-2^+3^-)$ $(2^+1^-3^-)$	$(2^+2^+0^+)$	$(2^+2^+2^+)$	$(2^+2^+4^+)$
$[(00)_s, \times (22)](22)_s A_1^{0^+}$	$\sqrt{6}/4$				$-\sqrt{10}/4$		
$[(11)_s, \times (22)](22)_s A_2^{0^+}$		$\sqrt{30}/10$				$\sqrt{70}/10$	
$[(22)_s, \times (22)](00)_s A_3^{0^+}$	$\sqrt{30}/36$	$-\sqrt{42}/18$	$-\sqrt{15}/9$	$+\sqrt{21}/9$	$\sqrt{2}/12$	$\sqrt{2}/6$	$-\sqrt{3}/3$
$[(22)_s, \times (22)](22)_s A_4^{0^+}$		$\sqrt{5}/5$		$-\sqrt{10}/8$		$-\sqrt{105}/35$	$-5\sqrt{70}/56$
$[(22)_s, \times (22)](22)'_s A_5^{0^+}$	$-\sqrt{5}/5$		$\sqrt{10}/5$	$+\sqrt{14}/8$	$-\sqrt{3}/5$		$-7\sqrt{2}/40$
$[(22)_s, \times (22)](06+60)A_6^{0^+}$	$-2\sqrt{105}/45$	$-5\sqrt{3}/18$	$-\sqrt{210}/90$	$-2\sqrt{6}/9$	$-2\sqrt{7}/15$	$5\sqrt{7}/42$	$-2\sqrt{42}/105$
$[(22)_s \times (22)](44)A_7^{0^+}$	$\sqrt{7}/6$	$-\sqrt{5}/6$	$\sqrt{14}/6$	$-\sqrt{10}/12$	$\sqrt{105}/30$	$\sqrt{105}/42$	$-3\sqrt{70}/140$

TABLEAU II-1 : Ensemble des 7 opérateurs à 3 particules orthonormés , scalaires, symétriques et hermitiques du type $[(11)\otimes\{2\}]\times(22)$

a) Le cas des représentations intermédiaires ($\lambda'=\mu'$) autoconjuguées.

La construction des opérateurs du type $\{[(22)\otimes\{2\}](\lambda'=\mu')\times(11)\}\lambda\tau 0^+$ ne présente pas de difficultés particulières par rapport au cas précédent et se fait suivant le même principe, c'est-à-dire que les opérateurs sont obtenus à partir des tables des C.C.G. par la formule

$$\{[(22)\otimes\{2\}]\alpha'(\lambda'=\mu')\times(11)\}(\lambda=\mu)B^{0^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \tau'}$$

$$\langle(22)\tau_1 k_1^{\pm}+(22)\tau_2 k_2^{\pm}|\alpha'(\lambda'=\mu')\tau' k_3^{\pm}\rangle\langle(\lambda'=\mu')\tau' k_3^{\pm}\pm(11)k_3^{\pm}|(\lambda=\mu)\tau 0^+\rangle$$

$$\{[(22)\tau_1 V^{k_1^{\pm}}(22)\tau_2 V^{k_2^{\pm}}]^{k_3}(11)V^{k_3^{\pm}}0\}$$

et les différents opérateurs concernés sont les opérateurs 0^+ de la liste ci-dessous

2 opérateurs × 3^e opérateur	=>	opérateur final
$(00)_{s'}\times(11)$		aucun
$(22)_{s'}\times(11)$		$(22)0^+$ $(22)0^-$
$(22)'_{s'}\times(11)$		$(22)'0^+$ $(22)'0^-$
$(44)_{s'}\times(11)$		$(44)0^+$ $(44)0^-$
$(11)_{s'}\times(11)$		$(00)_s 0^+$
		$(22)_s 0^+$
$(33)_{s'}\times(11)$		$(22)_s 0^+$
		$(44)_s 0^+$

b) <u>Le cas des représentations intermédiaires $(\lambda\mu)'$ non autoconjuguées.</u>

On considère ici le problème du couplage du 3[e] opérateur avec les opérateurs à 2 particules du type $(06\pm60)k^{\pm}$ et $(14\pm41)k^{\pm}$.

On sait d'une part définir des opérateurs à 2 particules d'hermiticité définie tels que

$$(14\pm41)k^{\mp} = \Sigma \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle(22)k_1+(22)k_2|(14)k\rangle \pm \langle(22)k_1+(22)k_2|(41)k] \quad .$$

D'autre part les C.C.G. calculés permettent d'exprimer les opérateurs classés à 3 particules :

$$O_1 = \sum_{\psi_1\psi_2} \langle(22)+(22)|(14)k_3\rangle\langle(14)k_3+(11)k_3|(\lambda\mu)0\rangle$$

$$O_2 = \sum_{\psi_1\psi_2} \langle(22)+(22)|(41)k_3\rangle\langle(41)k_3+(11)k_3|(\mu\lambda)0\rangle \quad .$$

On veut construire à partir d'eux des opérateurs d'hermiticité déterminée.

Les C.C.G. du type $\langle(14)+(11)|(\lambda\mu)0\rangle$ vérifient

$$\langle(14)\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}+(11)\begin{smallmatrix}1^-\\2^+\end{smallmatrix}|(22)0\rangle = \begin{matrix}\alpha\\\beta\end{matrix} \qquad \langle(14)\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}+(11)\begin{smallmatrix}1^-\\2^+\end{smallmatrix}|(06)0\rangle = \begin{matrix}\alpha\\\beta\end{matrix}$$

$$\langle(41)\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}+(11)\begin{smallmatrix}1^-\\2^+\end{smallmatrix}|(22)0\rangle = \begin{matrix}-\alpha\\\beta\end{matrix} \qquad \langle(41)\begin{smallmatrix}1\\2\end{smallmatrix}+(11)\begin{smallmatrix}1^-\\2^+\end{smallmatrix}|(60)0\rangle = \begin{matrix}-\alpha\\\beta\end{matrix}$$

On peut donc définir les C.C.G.

$$\langle(14-41)1^-+(11)1^-|(22)0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle(14)1+(11)1|(22)0\rangle - \langle(41)1+(11)1|(22)0\rangle]$$

$$\langle(14+41)2^++(11)2^+|(22)0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle(14)2+(11)2|(22)0\rangle + \langle(41)2+(11)2|(22)0\rangle]$$

$$\langle(14-41)1^-+(11)1^-|(06-60)0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle(14)1+(11)1|(06)0\rangle - \langle(41)1+(11)1|(60)0\rangle]$$

$$\langle(14+41)2^++(11)2^+|(06+60)0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle(14)2+(11)2|(22)0\rangle + \langle(41)2+(11)2|(22)0\rangle]$$

conduisant à des opérateurs hermitiques, ainsi que ceux conduisant aux opérateurs antihermitiques $\langle(14+41)1^+ + (11)1^-|(\lambda\mu+\mu\lambda)0^-\rangle$

$\langle(14-41)2^- + (11)2^+|(\lambda\mu-\mu\lambda)0^-\rangle$.

Et finalement on peut construire l'opérateur hermitique suivant :

$$\sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle(22)+(22)|(\lambda\mu-\mu\lambda)'1^-\rangle\langle(\lambda\mu-\mu\lambda)'1^- + (11)1^-|(\lambda\mu-\mu\lambda)0^+\rangle \{[(22)\tau_1 V^{k_1}(22)\tau_2 V^{k_2}]^{1^-}(11)V^{1^-}\}^{0^+}$$

$$+ \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle(22)+(22)|(\lambda\mu+\mu\lambda)'2^+\rangle\langle(\lambda\mu+\mu\lambda)'2^+ + (11)2^+|(\lambda\mu+\mu\lambda)0^+\rangle \{[(22)\tau_1 V^{k_1}(22)\tau_2 V^{k_2}]^{2^+}(11)V^{2^+}\}^{0^+}$$

opérateur que nous notons $(\lambda\mu\pm\mu\lambda)0^+$.

Les différents cas qui apparaissent ici sont

$(06+60)\times(11) \Rightarrow (06+60)0^+$

$(06-60)\times(11) \Rightarrow (06-60)0^-$

$(14+41)\times(11)$ et $(14-41)\times(11) \Rightarrow (06\pm60)0^+, (22)0^+$

$(14+41)\times(11)$ et $(14-41)\times(11) \Rightarrow (06\pm60)0^-, (22)0^-$

Seuls les 0^+ nous intéressent et ont été construits.

L'ensemble des 10 opérateurs $[(22)\otimes\{2\}](11)$ obtenus est donné par le tableau suivant :

$\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_{S'\times}(11)\}\lambda 0^+$ / $\{\lambda'_{S'\times}(11)\}\lambda 0^+$	$(0^+2^+2^+)$ $(2^+0^+2^+)$	$(2^+2^+2^+)$	$(2^+2^-1^-)$ $-(2^-2^+1^-)$	$(2^+3^-1^-)$ $(3^-2^+1^-)$	$(2^+4^+2^+)$ $(4^+2^+2^+)$	$(2^-2^-2^+)$	$(2^-3^-2^+)$ $-(3^-2^-2^+)$	$(3^-3^-2^+)$	$(3^-4^+1^-)$ $(4^+3^-1^-)$	$(4^+4^+2^+)$
$\{(22)_{S'}\times(11)\}\ (22)\ B^{0^+}_1$	$2\sqrt{35}/35$	$-39\sqrt{70}/980$	0	0	$51\sqrt{210}/1960$	$-\sqrt{70}/28$	$3\sqrt{14}/56$	$2\sqrt{105}/35$	0	$-\sqrt{385}/49$
$\{(22)'_{S'}\times(11)\}\ (22)'\ B^{0^+}_2$	0	$-\sqrt{50}/28$	0	0	$-15\sqrt{6}/56$	$\sqrt{2}/4$	$\sqrt{10}/8$	0	0	$-\sqrt{11}/7$
$\{(06\pm60)_{S'}\times(11)\}(06\pm60)B^{0^+}_3$	$2\sqrt{5}/15$	$\sqrt{10}/6$	0	0	$\sqrt{30}/15$	$\sqrt{10}/6$	$\sqrt{2}/3$	0	0	0
$\{(44)_{S'}\times(11)\}(44)\ B^{0^+}_4$	$-\sqrt{33}/9$	$5\sqrt{66}/126$	0	0	$\sqrt{22}/84$	$-\sqrt{66}/18$	$\sqrt{330}/36$	0	0	$-2\sqrt{3}/21$
$\{(11)_{S'}\times(11)\}(00)\ B^{0^+}_5$	$\sqrt{6}/9$	$-29\sqrt{3}/252$	$-\sqrt{10}/12$	$-2\sqrt{14}/21$	$-1/7$	$-5\sqrt{3}/36$	$\sqrt{15}/9$	$-\sqrt{2}/12$	$\sqrt{35}/14$	$5\sqrt{66}/84$
$\{(11)_{S'}\times(11)\}(22)\ B^{0^+}_6$	$\sqrt{10}/15$	$-29\sqrt{5}/420$	$5\sqrt{6}/36$	$2\sqrt{210}/63$	$-\sqrt{15}/35$	$-\sqrt{5}/12$	[illegible]	$-\sqrt{30}/60$	$-5\sqrt{21}/42$	$\sqrt{110}/28$
$\{(14\pm41)_{S'}\times(11)\}(22)\ B^{0^+}_7$	$4\sqrt{2}/15$	$5/21$	$4\sqrt{30}/45$	$\sqrt{42}/63$	$-3\sqrt{3}/70$	$-1/3$	$-\sqrt{5}/30$	$-\sqrt{6}/6$	$4\sqrt{105}/105$	$-\sqrt{22}/14$
$\{(14\pm41)_{S'}\times(11)\}(06\pm60)B^{0^+}_8$	$8\sqrt{3}/45$	$5\sqrt{6}/63$	$-4\sqrt{5}/15$	$-\sqrt{7}/21$	$-3\sqrt{2}/20$	$-\sqrt{6}/9$	$-\sqrt{30}/90$	$-1/3$	$-2\sqrt{70}/35$	$-\sqrt{3}/21$
$\{(33)_{S'}\times(11)\}(22)\ B^{0^+}_9$	$-\sqrt{210}/105$	$-23\sqrt{105}/588$	$\sqrt{14}/12$	$-2\sqrt{10}/12$	$31\sqrt{35}/490$	$\sqrt{105}/84$	$\sqrt{22}/42$	$-3\sqrt{30}/52$	$-1/4$	$-\sqrt{2310}/392$
$\{(33)_{S'}\times(11)\}(44)\ B^{0^+}_{10}$	$\sqrt{30}/45$	$23\sqrt{15}/252$	$\sqrt{2}/4$	$-\sqrt{30}/14$	$-31\sqrt{5}/210$	$-\sqrt{15}/36$	$-\sqrt{3}/12$	$\sqrt{10}/8$	$-3\sqrt{7}/28$	$\sqrt{330}/168$

Tableau II-2 Ensemble des 10 opérateurs à 3 particules orthonormés, scalaires symétriques [illegible] de type $[(22)\otimes\{2\}]\times(11)$

III) Cas des opérateurs $(11)\otimes\{3\}$.

Ces opérateurs, construits sur des produits $(11)(11)(11)$, doivent être complètement symétriques en $k_1\ k_2\ k_3$. En particulier, le couplage des 2 premiers opérateurs doit être symétrique en $k_1\ k_2$ et on peut donc se limiter aux représentations du pléthysme

$$(11)\otimes\{2\} \rightarrow (00)_s, 0^+$$
$$(22)_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+$$
$$(11)_s, 1^-, 2^+ \quad .$$

Le couplage avec le 3e opérateur donne les possibilités d'hermiticité définie

$$(22)_s, \times(11) \rightarrow (22)0^+$$
$$(22)0^-$$
$$(11)_s, \times(11) \rightarrow (00)0^+$$
$$(22)0^+$$

mais cette fois les opérateurs obtenus ne sont pas complètement symétriques en $k_1\ k_2\ k_3$; il faut les combiner entre eux de façon à faire apparaître les symétriques formant une base pour les représentations λ_s appartenant au pléthysme $(11)\otimes\{3\}$.

On retrouve bien le fait constaté dans la classification formelle, à savoir, qu'on doit pouvoir construire les 2 opérateurs :

-a) $[(11)\otimes\{3\}](00)_s 0^+ \equiv \{[(11)\otimes\{2\}](11)_s, \times(11)\}(00)_s 0^+$,

ici les C.C.G. conduisent directement à la solution symétrique cherchée

et -b) $[(11)\otimes\{3\}](22)_s 0^+$ combinaison linéaire symétrique en $k_1\ k_2\ k_3$ des 2 opérateurs symétriques en $k_1\ k_2$

$\{[(11)\otimes\{2\}](11)_s, \times(11)\}(22)_s, 0^+$ et $\{[(11)\otimes\{2\}](22)_s, \times(11)\}(22)_s, 0^+$

Dans une première étape on construit les opérateurs "composants" $(22)_s,0^+$ et $(22)_s,0^+$ suivant le même principe que précédemment ainsi que l'opérateur $(00)_s0^+$. En posant :

$$0_1 = [\{(11)v^1(11)v^2\}^1(11)v^1]^0 = (1^-2^+1^-)$$

$$0_2 = [\{(11)v^2(11)v^1\}^1(11)v^1]^0 = (2^+1^-1^-)$$

$$0_3 = [\{(11)v^1(11)v^1\}^2(11)v^2]^0 = (1^-1^-2^+)$$

$$P = [\{(11)v^2(11)v^2\}^2(11)v^2]^0 = (2^+2^+2^+)$$

on trouve les résultats

$$\{[(11)(11)](11)_s,x(11)\}(00)_s0^+ = \frac{\sqrt{3}}{4}[0_1+0_2+0_3] + \frac{\sqrt{7}}{4}P \quad \text{complètement symétrique, et :}$$

$$\left.\begin{aligned}\{[(11)(11)](11)_s,x(11)\}(22)_10^+ &= -\frac{\sqrt{5}}{4}[0_1+0_2] + \frac{3\sqrt{5}}{20}0_3 + \frac{\sqrt{105}}{20}P \\ \{[(11)(11)](22)_s,x(11)\}(22)_20^+ &= \frac{\sqrt{70}}{10}0_3 - \frac{\sqrt{30}}{10}P\end{aligned}\right\} \text{ symétriques en } k_1\ k_2$$

On voit qu'on peut construire avec les 2 opérateurs $(22)_10^+$ et $(22)_20^+$ un opérateur complètement symétrique en $k_1\ k_2\ k_3$ et orthogonal à $(00)_s0^+$ en prenant

$$\{(11)\otimes\{3\}(22)_s0^+ = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{\frac{7}{5}}(22)_10^+ - \sqrt{\frac{8}{5}}(22)_20^+\right]$$

On a finalement construit les 2 opérateurs cherchés du type $(11)\otimes\{3\}$ suivants :

Tableau II-3

$[(11)\otimes\{3\}]$	$(1^-2^+1^-)$ $(2^+1^-1^-)$ $(1^-1^-2^+)$	$(2^+2^+2^+)$
$[(11)\otimes\{3\}](00)_s\ C_1^{0^+} = \{[(11)(11)](11)_s,x(11)\}(00)_s0^+$	3/4	$\sqrt{7/4}$
$[(11)\otimes\{3\}](22)_s C_2^{0^+} = \sqrt{\frac{7}{15}}\{[(11)(11)](11)_s,x(11)\}(22)0^+ - \sqrt{\frac{8}{15}}\{[(11)(11)](22)_s,x(11)\}(22)0^+$	$-\sqrt{7/4}$	3/4

Ensemble des 2 opérateurs à 3 particules orthonormés , scalaires, symétriques et hermitiques du type $[(11)\otimes\{3\}]$.

IV) Cas des opérateurs $[(22)\otimes\{3\}]$.

La construction des opérateurs du type $[(22)\otimes\{2\}](11)$ a présenté des difficultés liées à la séparation des parties hermitiques et anti-hermitiques lorsqu'on couple le 3ème opérateur et la construction des opérateurs $(11)\otimes\{3\}$ a fait apparaître le problème de la symétrisation complète. Ici les 2 difficultés se conjuguent et une troisième apparaît : les opérateurs sont beaucoup plus nombreux et les tableaux de C.C.G. correspondants beaucoup plus lourds à manipuler ; les calculs ont dû être faits sur ordinateur.

Le couplage des 2 premiers opérateurs doit être symétrique en $k_1\ k_2$ et correspond aux représentations du pléthysme

$$(22)\otimes\{2\} = \sum_{\lambda'_s} \{\alpha'\lambda'_s, \tau k\}$$

Liste 1

$(00)_s, 0^+$

$(22)_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+$

$(22)'_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+$

$(06)0,2,4$ et $(60)0,2,4$ $\rightarrow$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(06-60)0^+, 2^+, 4^+$; $\frac{1}{\sqrt{2}}(06+60)0^-, 2^-, 4^-$

$(44)_s, 0^+, 2^+, 2^-, 3^-, 4^+_a, 4^+_b, 4^-$

$(11)_s, 1^-, 2^+$

$(14)1,2,3,4$ et $(41)1,2,3,4$ $\rightarrow$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(14-41)1^+, 2^+, 3^+, 4^+$; $\frac{1}{\sqrt{2}}(14+41)1^-, 2^-, 3^-, 4^-$

$(33)_s, 1^-, 2^+, 3^-, 3^+, 4^+, 4^-$

Le couplage avec le 3ème opérateur $(22)V^{k_3}$ conduit aux possibilités suivantes :

$(00)_s, \times (22) \rightarrow (22)0^+$

$(22)_s, \times (22) \rightarrow (22)_s0^+,(22)'_s0^+,(22)_a0^-,(00)_s0^+,(06+60)_s0^-,(44)_s0^+$
$(06-60)_s0^+$

$(22)'_s, \times (22) \rightarrow (22)_s0^+,(22)'_s0^+,(22)_a0^-,(00)_s0^+,(06+60)_s0^-,(44)_s0^+$
$(06-60)_s0^+$

$(06) \times (22) \rightarrow (22)0,(06)0,(44)0,(28)0$
$(60) \times (22) \rightarrow (22)0,(60)0,(44)0,(82)0$

$(44)_s, \times (22) \rightarrow (22)0^+,(06+60)0^-,(44)_10^+,(44)_20^+,(28+82)0^-,(66)0^+$
$(06-60)0^+ \quad (44)0^- \quad (28-82)0^+$

$(11)_s, \times (22) \rightarrow (22)0^+$
$(22)0^-$

$(14) \times (22) \rightarrow (22)0,(22)'0,(06)0,(44)0$
$(41) \times (22) \rightarrow (22)0,(22)'0,(60)0,(44)0$

$(\bar{3}\bar{3})_s, \times (22) \rightarrow (22)0^+,(06+60)0^-,(44)0^+$
$(22)0^-,(06-60)0^+,(44)0^-$

Liste 2

$$[(22)\otimes\{2\}](22) = \lambda'_s, \times (22) = \sum_{\lambda} \alpha\lambda\tau 0$$

Nous examinons d'abord le problème de la séparation des parties hermitiques et antihermitiques dans le cas du couplage des représentations intermédiaires (06) et (60) ou (14) et (41) avec (22) ; la symétrisation des opérateurs $[(22)\otimes\{2\}_{k_1k_2}](22)_{k_3}\lambda 0^+$, de façon à faire apparaître pour λ donnée la représentation symétrique λ_s

appartenant au pléthysme $(22)\otimes\{3\}$, nous conduit ensuite à étudier combien de combinaisons symétriques λ_s doivent être trouvées. Enfin nous les déterminons explicitement.

1°) Séparation des parties hermitiques et antihermitiques des couplages $(06,60)\times(22)$ et $(14,41)\times(22)$.

Les C.C.G. du type $\langle(06)+(22)|(\lambda\mu)0\rangle$ donnés dans le tableau de résultats général vérifient :

$$\langle(06)0+(22)0^+|(\lambda\mu)0\rangle = a \qquad \langle(60)0+(22)0^+|(\mu\lambda)0\rangle = a$$
$$\langle(06)2+(22)2^+|(\lambda\mu)0\rangle = b \qquad \langle(60)2+(22)2^+|(\mu\lambda)0\rangle = b$$
$$\langle(06)2+(22)2^-|(\lambda\mu)0\rangle = c \qquad \langle(60)2+(22)2^-|(\mu\lambda)0\rangle = -c$$
$$\langle(06)4+(22)4^+|(\lambda\mu)0\rangle = d \qquad \langle(60)4+(22)4^+|(\mu\lambda)0\rangle = d$$

où $(\lambda\mu)$ et $(\mu\lambda)$ sont 2 représentations conjuguées. On a donc :

$$|(\lambda\mu)0\rangle = a[(06)0(22)0^+]+b[(06)2(22)2^+]+c[(06)2(22)2^-]+d[(06)4(22)4^+]$$

$$|(\mu\lambda)0\rangle = a[(60)\quad]+b[(60)\quad]-c[(60)\quad]+d[(60)\quad].$$

On sait d'autre part que les opérateurs à 2 particules peuvent être construits du type $(06+60)k^-$ et $(06-60)k^+$.

On peut alors construire des opérateurs à 3 particules d'hermiticité définie en considérant les ensembles :

$$[\lambda\mu\pm\mu\lambda]0^- = a[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06+60)0^-(22)0^+]+b[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06+60)2^-(22)2^+]$$
$$+c[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06-60)2^+(22)2^-]+d[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06+60)4^-(22)4^+]$$

$$[\lambda\mu\pm\mu\lambda]0^+ = a[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06-60)0^+(22)0^+]+b[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06-60)2^+(22)2^+]$$
$$+c[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06+60)2^-(22)2^-]+d[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(06-60)4^+(22)4^+] .$$

Remarque importante à propos des conventions de signe des C.C.G. et des notations des opérateurs couplés.

Les signes des C.C.G. correspondant à des représentations non autoconjuguées ont été choisis de façon à vérifier

$$\langle(\lambda\mu)k_i\|V^{+2}\|(\lambda\mu)k_j\rangle = -\langle(\mu\lambda)k_i\|V^{+2}\|(\mu\lambda)k_j\rangle \quad .$$

Les C.C.G. ainsi déterminés vérifient pour toutes les valeurs de k la propriété $\langle(22)k_1+(22)k_2|(\lambda\mu)k\rangle = \pm\langle(22)k_1+(22)k_2|(\mu\lambda)k\rangle$ avec + ou - selon que le produit des hermiticités de $(22)k_1^{\pm}$ et $(22)k_2^{\pm}$ est du type + ou - . Suivant les ensembles $(\lambda\mu)$ et $(\mu\lambda)$ traités c'est parfois le choix inverse qui a été fait mais, de toute façon, ce qui est important c'est le fait que le choix est le même pour toutes les valeurs de k d'un ensemble $(\lambda\mu)$, $(\mu\lambda)$ donné.

Les C.C.G. obtenus par combinaisons du type

$(\lambda\mu\pm\mu\lambda)k^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}[(\lambda\mu)k \pm (\mu\lambda)k]$ vérifient alors $(\lambda\mu+\mu\lambda)k_1^+\ldots k_n^+$

$(\lambda\mu-\mu\lambda)k_1^-\ldots k_n^-$

ou le contraire $(\lambda\mu+\mu\lambda)k_1^-\ldots k_n^-$

$(\lambda\mu-\mu\lambda)k_1^+\ldots k_n^+$.

Dans ces conditions les opérateurs à 3 particules construits à partir d'eux se développent en fonction de produits d'opérateurs du type

$\Sigma\langle(\lambda\mu+\mu\lambda)k^+ +(22)k^+|(\lambda\mu+\mu\lambda)'0^+\rangle..+\Sigma\langle(\lambda\mu-\mu\lambda)k^- +(22)k^-|(\lambda\mu-\mu\lambda)'0^+\rangle\ldots$

et nous les avons notés $(\lambda\mu\pm\mu\lambda)0^+$.

Il aurait été préférable de choisir les signes des C.C.G. $(\mu\lambda)k$ de façon à vérifier la propriété

$$\langle(\lambda\mu)k_i\|V^{+2}\|(\lambda\mu)k_j\rangle = (-1)^{k_i+k_j+1}\langle(\mu\lambda)k_i\|V^{+2}\|(\mu\lambda)k_j\rangle \quad (k_i \text{ non dégénéré}).$$

Dans ces conditions les C.C.G. combinés auraient vérifié

$(\lambda\mu+\mu\lambda)k_1^+k_2^-k_3^+\ldots$ $\qquad$ par exemple $\qquad$ $(14+41)1^-2^+3^-4^+$

$(\lambda\mu-\mu\lambda)k_1^-k_2^+k_3^-\ldots$ $\qquad$ $(14-41)1^+2^-3^+4^-$.

Un opérateur scalaire à 3 particules hermitique se développerait sur un seul type de produits, par exemple :

$$\Sigma\langle(\lambda\mu+\mu\lambda)3^-+(22)3^-|(\lambda\mu+\mu\lambda)0^+\rangle\ldots+\langle(\lambda\mu+\mu\lambda)4^++(22)4^+|(\lambda\mu+\mu\lambda)0^+\rangle\ldots$$

et pourrait alors être noté simplement $(\lambda\mu+\mu\lambda)0^+$.

D'autre part ces conventions de signe, pour k dégénéré, auraient été pleinement compatibles avec la notation $(25+52)3^-,3^+$ et $(25-52)3^+,3^-$.

Cependant l'ensemble des calculs ayant été réalisé avec les C.C.G. vérifiant l'autre convention, nous avons préféré éviter les risques d'erreur et les conserver tels quels.

Suivant le même principe les représentations (14) et (41) permettent de définir les opérateurs

$$[\lambda\mu\pm\mu\lambda]0^- = \alpha[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14+41)2^-(22)2^+]+\beta[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14-41)2^+(22)2^-]$$
$$+\gamma[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14-41)3^+(22)3^-]+\delta[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14+41)4^-(22)4^+]$$

$$[\lambda\mu\pm\mu\lambda]0^+ = \alpha[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14-41)2^+(22)2^+]+\beta[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14+41)2^-(22)2^-]$$
$$+\gamma[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14+41)3^-(22)3^-]+\delta[\tfrac{1}{\sqrt{2}}(14-41)4^+(22)4^+].$$

Finalement les différents cas suivants, en notation symbolique, se définissent de la même façon

$$\left.\begin{matrix}(06)\\(60)\end{matrix}\right\} \times (22) \rightarrow \begin{matrix}(22)0^+ & [06\mp60]0^+ & (44)0^+ & (28\mp82)0^+\\ (22)0^- & [06\pm60]0^- & (44)0^- & (28\pm82)0^-\end{matrix}$$

$$\left.\begin{matrix}(14)\\(41)\end{matrix}\right\} \times(22) \rightarrow \begin{matrix}(22)0^+ & (22)'0^+ & (06\mp60)0^+ & (44)0^+\\ (22)0^- & (22)'0^- & (06\pm60)0^- & (44)0^-\end{matrix}$$

2°) Nombre de combinaisons symétriques et hermitiques de type λ donnée.

D'après le pléthysme $(22)\otimes\{3\} \Rightarrow 2(00)+7(22)+4(44)+3\underset{(06)}{(60)}+(66)+\underset{(82)}{(28)}$

22 opérateurs scalaires symétriques en $k_1\ k_2\ k_3$ peuvent être construits et, d'après la classification formelle des opérateurs par l'étude directe des triades $(k_1\ k_2\ k_3)$, 15 opérateurs scalaires symétriques et hermitiques peuvent être déterminés ; 7 combinaisons symétriques sont donc antihermitiques.

Examinons successivement les différents cas :

a) Cas des opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda\times(22)\}(00)0$.

On utilise les 2 résultats suivants :

- Le développement du pléthysme $(22)\otimes\{3\}$ introduit 2 opérateurs $(00)0$ d'hermiticité a priori inconnue.
- Les listes 1 et 2 des différents cas de couplage $[(22)\otimes\{2\}](22)$ données au début de ce paragraphe montrent que 2 opérateurs $(00)0^+$ et $(00)'0^+$ interviennent et qu'il n'existe aucun opérateur $(00)0^-$.

On en déduit que les 2 opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}](22)_s,\times(22)\}(00)_s0^+$

et $\{[(22)\otimes\{2\}](22)'_s,\times(22)\}(00)'_s0^+$

sont les 2 opérateurs cherchés, c'est-à-dire qu'ils s'expriment

directement à l'aide des tables de C.C.G. ; ils sont bien symétriques en $k_1\ k_2\ k_3$ et forment bien une base pour les 2 représentations $(00)_s$ du pléthysme $(22)\otimes\{3\}$.

b) Cas des opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_s,\times(22)\}(66)0$.

Le développement du pléthysme indique qu'on doit trouver un opérateur symétrique $(66)_s$. Les listes 1 et 2 montrent qu'un seul opérateur $(66)0^+$ intervient venant du couplage $(44)_s,\times(22)$. L'opérateur $\{[(22)\otimes\{2\}](44)_s,\times(22)\}(66)_s0^+$ est l'opérateur symétrique cherché appartenant au pléthysme $(22)\otimes\{3\}$.

c) Cas des opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_s,\times(22)(28)0$. (82)

Une opérateur $(28)_s$ et un opérateur $(82)_s$ interviennent dans le développement de $(22)\otimes\{3\}$. Les listes 1 et 2 montrent que les opérateurs $(28)0$ et $(82)0$ viennent des produits

$$(44)_s,\times(22)\ ,\ (06)\times(22)\ \text{ et }\ (60)\times(22)\ .$$

On a d'une part $(44)_s,\times(22) \rightarrow \begin{matrix}(28+82)0^+ & (1)\\ (28-82)0^- & (2)\end{matrix}$,

d'autre part on a vu à propos de la séparation des parties hermitiques et antihermitiques qu'on peut construire les 2 opérateurs

$$\begin{matrix}(06\pm60)\times(22) \rightarrow (28\pm82)0^+ & (3)\\ (06\mp60)\times(22) \rightarrow (28\mp82)0^- & (4)\end{matrix}\ .$$

De même les 2 opérateurs $(28)_s$ et $(82)_s$ appartenant au pléthysme $(22)\otimes\{3\}$ permettent de définir les 2 opérateurs $\begin{matrix}(28\pm82)0^+\\ (28\mp82)0^-\end{matrix}$. On en déduit qu'on doit trouver une combinaison linéaire de

$[(06\pm60)\times(22)](28\pm82)0^+$ et de $[(44)\times(22)](28+82)0^+$ formant l'opérateur $(28+82)_s0^+$ cherché, soit :

$$[(22)\otimes\{3\}](28+82)_s0^+ = \alpha\{[(22)\otimes\{2\}](06\pm60)_{s'}\times(22)\}(28\pm82)0^+$$

$$+\beta\{[(22)\otimes\{2\}](44)_{s'}\times(22)\}(28+82)0^+ \quad .$$

d) Cas des opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_{s'}\times(22)\}\begin{matrix}(06)\\(60)\end{matrix}0$.

Le pléthysme $(22)\otimes\{3\}$ contient dans son développement 3 opérateurs symétriques (06) et 3 opérateurs symétriques (60) avec lesquels ont peut définir

- 3 opérateurs $(06\pm60)_s0^+$
- 3 opérateurs $(06\mp60)_s0^-$.

Les listes 1 et 2 des différents cas de couplage $[(22)\otimes\{2\}](22)$ et le principe de la séparation hermitique montrent les possibilités suivantes :

$$(22)_{s'}\times(22) \rightarrow (06-60)0^+ \quad (06+60)0^-$$
$$(22)'_{s'}\times(22) \rightarrow (06-60)0^+ \quad (06+60)0^-$$
$$(06\pm60)\times(22) \rightarrow (06\mp60)0^+$$
$$(06\mp60)\times(22) \rightarrow \quad (06\pm60)0^-$$
$$(33)\times(22) \rightarrow (06-60)0^+ \quad (06+60)0^-$$
$$(44)\times(22) \rightarrow (06-60)0^+ \quad (06+60)0^-$$
$$(14\pm41)\times(22) \rightarrow (06-60)0^+$$
$$(14\mp41)\times(22) \rightarrow \quad (06-60)0^- \quad .$$

On en déduit qu'on doit pouvoir trouver 3 opérateurs symétriques $(06-60)_s0^+$ combinaisons linéaires des 6 opérateurs constituants $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_{s'}\times(22)\}(06\mp60)0^+$.

e) Cas des opérateurs $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_s,\times(22)\}^{(22)}_{(44)}$.

Parmi les 7 combinaisons symétriques antihermitiques à enlever du pléthysme $(22)\otimes\{3\}$ pour retrouver les 15 cas possibles symétriques et hermitiques, on en connaît déjà 4, à savoir $\begin{matrix}1\times(28\pm82)0^-\\3\times(06\mp60)0^-\end{matrix}$. Il en reste 3 à éliminer. D'autre part, on a vu que les 2 opérateurs (00) et (66) sont hermitiques. On peut donc en déduire que, parmi les 7 opérateurs $(22)_s$ et les 4 opérateurs $(44)_s$, 3 peuvent être choisis antihermitiques et 8 hermitiques, mais on ne sait pas a priori combien de combinaisons hermitiques et symétriques de chaque sorte (22) et (44) on peut construire.

Examinons les différentes possibilités $\{[(22)\otimes\{2\}]\lambda'_s,\times(22)\}^{(22)}_{(44)}$ d'hermiticité définie :

λ'_s,x(22)	$(22)0^+$	$(22)0^-$	$(44)0^+$	$(44)0^-$
(00)x(22)	$(22)0^+$			
$(22)_s$,x(22)	$(22)0^+$ $(22)'0^+$	$(22)0^-$	$(44)0^+$	
$(22)'_s$,x(22)	$(22)0^+$ $(22)'0^+$	$(22)0^-$	$(44)0^+$	
$(06\pm60)_s$,x(22) $(06\mp60)_s$,x(22)	$(22)0^+$	$(22)0^-$	$(44)0^+$	$(44)0^-$
(44)x(22)	$(22)0^+$		$(44)_1 0^+$ $(44)_2 0^+$	$(44)0^-$
(11)x(22)	$(22)0^+$	$(22)0^-$		
(14 ± 41)x(22) (14 ∓ 41)x(22)	$(22)0^+$ $(22)'0^+$	$(22)0^-$ $(22)'0^-$	$(44)0^+$	$(44)0^-$
(33)x(22)	$(22)0^+$	$(22)0^-$	$(44)0^+$	$(44)0^-$
Σ	11	7	7	4

les 7 opérateurs $(22)0^-$ et les 4 opérateurs $(44)0^-$ doivent donner 3 combinaisons symétriques.

Supposons, par exemple, qu'on ait $2\times(22)_s 0^-$ et $1\times(44)_s 0^-$. On en déduit que les

11 opérateurs $(22)0^+$ doivent donner (7-2)=5 combinaisons symétriques $(22)_s 0^+$

7 opérateurs $(44)0^+$ " " (4-1)=3 " " $(44)_s 0^+$

mais on ne peut pas éliminer les autres possibilités et les 4 cas suivants sont possibles.

Nombre de	$(22)_s 0^-$	3	2	1	0
"	$(44)_s 0^-$	0	1	2	3
"	$(22)_s 0^+$	4	5	6	7
"	$(44)_s 0^+$	4	3	2	1

mais certains (les 2 cas extrêmes) très improbables.

3°) Détermination explicite des opérateurs $[(22)\otimes\{3\}]\lambda_s 0^+$.

a) Opérateurs $[(22)\otimes\{3\}](00)_s 0^+ , D_1^{0^+}$ et $D_2^{0^+}$ et $[\ "\ ](66)_s 0^+ , D_3^{0^+}$.

D'après ce qui vient d'être vu, les opérateurs $D_{1,2,3}^{0^+}$ s'expriment directement à l'aide des tables de C.C.G. par les formules :

$$[(22)\otimes\{3\}](00)_s D_1^{0^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \tau'} \langle (22)\tau_1 k_1 + (22)\tau_2 k_2 | (22)_s, \tau' k_3 \rangle \langle (22)\tau' k_3 + (22)\tau_3 k_3 | (00)_s 0^+ \rangle \left\{ [(22)\tau_1 V^{k_1} (22)\tau_2 V^{k_2}]^{k_3} (22)\tau_3 V^{k_3} \right\}^0$$

$$[(22)\otimes\{3\}](00)_s D_2^{0^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \tau'} \langle (22)\tau_1 k_1 + (22)\tau_2 k_2 | (22)'_s, \tau' k_3 \rangle \langle (22)\tau' k_3 + (22)\tau_3 k_3 | (00)_s 0^+ \rangle \left\{ [(22)\tau_1 V^{k_1} (22)\tau_2 V^{k_2}]^{k_3} (22)\tau_3 V^{k_3} \right\}^0$$

$$[(22)\otimes\{3\}](66)_s D_3^{0^+} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2 \tau_3 k_3 \tau'} \langle (22)\tau_1 k_1 + (22)\tau_2 k_2 | (44)_s, \tau' k_3 \rangle \langle (44)\tau' k_3 + (22)\tau_3 k_3 | (66)_s 0^+ \rangle \left\{ [(22)\tau_1 V^{k_1} (22)\tau_2 V^{k_2}]^{k_3} (22)\tau_3 V^{k_3} \right\}^0$$

b) Opérateur $[(22)\otimes\{3\}](28+82)D_4^{0^+}$.

On construit d'abord les 2 opérateurs composants

$[(06\pm60)\times(22)](28\pm82)0^+$

$[\ (44)\ \times(22)](28+82)0^+$ à l'aide des tables de C.C.G., à savoir :

$$\left\{[(22)(22)](06\pm60)_s,\times(22)\right\}(28+82)_A0^+ = \sum_{\substack{\tau_1k_1\tau_2k_2\\ k_3^+=0^+,2^+,4^+}} <(22)\tau_1k_1+(22)\tau_2k_2|(06-60)k_3^+>$$

$$<(06-60)k_3^++(22)k_3^+|(28+82)0^+>\left\{[(22)\tau_1V^{k_1}(22)\tau_2V^{k_2}]^{k_3}(22)\tau_3V^{k_3}\right\}^0$$

$$+\sum_{\tau_1k_1\tau_2k_2,k_3^-=2^-} <(22)\tau_1k_1+(22)\tau_2k_2|(06+60)k_3^-><(06+60)k_3^-+(22)k_3^-|(28+82)0^+>$$

$$\left\{k_1\ k_2\ k_3\right\}^0$$

et :

$$\left\{[(22)(22)](44)_s,\times(22)\right\}(28+82)_B0^+ = \sum_{\cdots\cdots} [<(22)\tau_1k_1+(22)\tau_2k_2|(06+60)k_3^->$$

$$<(44)_s,\tau'k_3+(22)\tau_3k_3|(28+82)0^+>\left\{k_1\ k_2\ k_3\right\}^0 \quad .$$

Les 2 composants ainsi obtenus sont donnés par le tableau II-4 suivant où l'on voit qu'ils sont bien symétriques en $k_1\ k_2$. La combinaison complètement symétrique cherchée se trouve facilement

$(28+82)_sD_4^{0^+} = \frac{\sqrt{5}}{3}(28+82)_A0^+ - \frac{2}{3}(28+82)_B0^+$ et conduit aux résultats de la deuxième colonne :

Triades	$(06160)\times(22)$ $(28+82)_A 0$	$(44)\times(22)$ $(28+82)_B 0$	$[(22)\otimes\{3\}](28+82)_S 0^+ = \frac{\sqrt{5}}{3}(28+82)_A - \frac{2}{3}(28+82)_B$
$(0^+0^+0^+)$	$8\sqrt{15}/75$	$-16\sqrt{55}/375$	→ $8\sqrt{55}/125$
$(2^+2^+0^+)$	$-\sqrt{55}/21$	$-8\sqrt{11}/105$	} → $-\frac{\sqrt{11}}{35}$
$(0^+2^+2^+)+(2^+0^+2^+)$	$\sqrt{55}/105$	$\sqrt{11}/15$	
$(2^-2^-0^+)$	$\sqrt{55}/75$	$-8\sqrt{11}/75$	} → $\frac{7\sqrt{11}}{75}$
$(0^+2^-2^-)+(2^-0^+2^-)$	$\sqrt{55}/25$	$-1\sqrt{11}/25$	
$(3^-3^-0^+)$	$-4\sqrt{77}/105$	$-4\sqrt{385}/525$	} → $\frac{-4\sqrt{385}}{525}$
$(0^+3^-3^-)+(3^-0^+3^-)$	0	$2\sqrt{385}/175$	
$(4^+4^+0^+)$	$-4\sqrt{11}/175$	$-12\sqrt{55}/875$	} → $\frac{4\sqrt{55}}{2625}$
$(0^+4^+4^+)+(4^+0^+4^+)$	$8\sqrt{11}/525$	$2\sqrt{55}/375$	
$(2^+2^+2^+)$	$\sqrt{55}/42$	$-\sqrt{11}/21$	→ $\sqrt{11}/14$
$(2^+2^+4^+)$	0	$-\sqrt{66}/70$	} → $\frac{\sqrt{66}}{105}$
$(2^+4^+2^+)+(4^+2^+2^+)$	$\sqrt{330}/210$	$-\sqrt{66}/420$	
$(2^-2^-2^+)$	$\sqrt{55}/42$	$\sqrt{11}/15$	} → $\frac{-1\sqrt{11}}{210}$
$(2^+2^-2^-)+(2^-2^+2^-)$	$-\sqrt{55}/70$	$-1\sqrt{11}/35$	
$(2^-3^-2^+)-(3^-2^-2^+)$	$\sqrt{22}/42$	$-1\sqrt{110}/60$	} → $\frac{2\sqrt{110}}{105}$
$-(2^+3^-2^-)+(3^-2^+2^-)$	$\sqrt{22}/14$	$1\sqrt{110}/140$	
$(2^+2^-3^-)-(2^-2^+3^-)$	0	$-\sqrt{110}/35$	
$3^-3^-2^+$	0	0	} → 0
$2^+3^-3^- + 3^-2^+3^-$	0	0	
$4^+4^+2^+$	0	$2\sqrt{2}/35$	} → $\frac{-4\sqrt{2}}{105}$
$2^+4^+4^+ + 4^+2^+4^+$	$-2\sqrt{10}/105$	$\sqrt{2}/105$	
$2^-4^+2^- + 4^+2^-2^-$	$\sqrt{330}/1050$	$-17\sqrt{66}/2100$	} → $\frac{11\sqrt{66}}{1575}$
$2^-2^-4^+$	$8\sqrt{330}/1575$	$\sqrt{66}/450$	
$3^-4^+2^- - 4^+3^-2^-$	$-2\sqrt{66}/105$	$-\sqrt{330}/525$	} → $\frac{-8\sqrt{330}}{1575}$
$-2^-4^+3^- + 4^+2^-3^-$	0	$4\sqrt{330}/525$	
$2^-3^-4^+ - 3^-2^-4^+$	$-2\sqrt{66}/315$	$\sqrt{330}/225$	
$3^-4^+3^- + 4^+3^-3^-$	0	$-\sqrt{30}/75$	} → $\frac{2\sqrt{30}}{225}$
$3^-3^-4^+$	$2\sqrt{6}/45$	$2\sqrt{30}/225$	
$4^+4^+4^+$	$2\sqrt{78}/525$	$-4\sqrt{390}/2625$	→ $\frac{2\sqrt{390}}{1125}$
	Opérateurs (28+82) composants		combinaison symétrique

TABLEAU II-4- Opérateur $[(22)\otimes\{3\}](28+82)_S 0^+$

c) Opérateurs $[(22)\otimes\{3\}](06\pm60)D^{0^+}_{5,6,7}$.

La construction des 6 opérateurs constituants se fait à l'aide des tables de C.C.G. suivant la méthode décrite précédemment, par exemple :

$$\left\{[(22)\otimes\{2\}](06\pm60)\atop \underset{(14\pm41)}{\text{ou}}\right\}(06\pm60)0^+ = \sum_{\dots} \langle(22)+(22)|(\lambda\mu\pm\mu\lambda)k_3^+\rangle$$

$$\langle(\lambda\mu\pm\mu\lambda)k_3^+ + (22)k_3^+|(06\pm60)0^+\rangle\{k_1\ k_2\ k_3\}^+$$

$$+ \sum_{\dots} \langle(22)+(22)|(\lambda\mu\mp\mu\lambda)k_3^- + (22)k_3^-|(06\mp60)0^+\rangle\{k_1\ k_2\ k_3\}^+$$

et conduit aux résultats portés dans le tableau II-5.

En écrivant que pour les opérateurs cherchés les coefficients des triades $(k_{i_1}\ k_{i_2}\ k_{i_3})$ et $(k_1\ k_2\ k_3)$ sont égaux pour toute permutation $(i_1\ i_2\ i_3)$ on obtient 14 équations linéaires à 6 inconnues dont 3 (ou 3 combinaisons d'entre elles) sont indépendantes et fournissent un système homogène à résoudre 3 fois dégénéré.

L'étude des équations permet de trouver 3 solutions simples, choisies de façon à annuler les coefficients de certaines triades par comparaison avec les propriétés des opérateurs symétriques déjà construits.

Les 3 combinaisons symétriques choisies $\alpha_1 \dots \alpha_6$ des 6 opérateurs constituants sont :

$(06+60)\delta^+$	$(22)\times(22)$	$(11)'\times(22)$	$(06260)\times(22)$	$(44)\times(22)$	$(14241)\times(22)$	$(33)\times(22)$
$\delta^+\delta^+\delta^+$	0	$16\sqrt{21}/225$	$-4\sqrt{14}/75$	$-8\sqrt{105}/375$	0	0
$\varepsilon^+\varepsilon^+\delta^+$	$8\sqrt{3}/45$	0	$\sqrt{70}/42$	$-4\sqrt{14}/105$	0	0
$\delta^+\varepsilon^+\varepsilon^- + \varepsilon^+\delta^+\varepsilon^-$	$-5\sqrt{3}/63$	0	$-\sqrt{70}/105$	$11\sqrt{21}/630$	$+2\sqrt{14}/105$	$8\sqrt{15}/315$
$\bar\varepsilon\bar\varepsilon\delta^+$	0	$-8\sqrt{105}/225$	$-\sqrt{70}/150$	$-4\sqrt{21}/75$	0	0
$\delta^+\varepsilon\bar\varepsilon + \bar\varepsilon\delta^+\varepsilon$	0	$\sqrt{105}/225$	$\sqrt{70}/75$	$7\sqrt{21}/150$	0	0
$\bar3\bar3\delta^+$	$-\sqrt{105}/45$	$7\sqrt{3}/45$	$2\sqrt{2}/15$	$-2\sqrt{15}/75$	0	0
$\delta^+\bar3\bar3 + \bar3\delta^+\bar3$	$-\sqrt{105}/126$	$\sqrt{3}/18$	0	$-11\sqrt{15}/225$	$\sqrt{10}/15$	$-2\sqrt{21}/63$
$4^+4^+\delta^+$	$-\sqrt{15}/3$	$-7\sqrt{21}/225$	$2\sqrt{14}/175$	$-6\sqrt{105}/875$	0	0
$\delta^+4^+4^+ + 4^+\delta^+4^+$	$\sqrt{15}/126$	$\sqrt{21}/450$	$88\sqrt{14}/1575$	$13\sqrt{105}/2205$	$\sqrt{70}/63$	$-22\sqrt{3}/189$
$\varepsilon^+\varepsilon^+\varepsilon^+$	$65\sqrt{3}/588$	$25\sqrt{105}/1764$	$-\sqrt{70}/42$	$-11\sqrt{21}/882$	$+5\sqrt{14}/294$	$46\sqrt{15}/441$
$\varepsilon^+\varepsilon^+4^+$	$-17\sqrt{2}/980$	$\sqrt{70}/196$	0	$-163\sqrt{14}/1470$	$-5\sqrt{21}/147$	$-11\sqrt{10}/147$
$\varepsilon^+4^+\varepsilon^+ + 4^+\varepsilon^+\varepsilon^+$	$-85\sqrt{2}/784$	$25\sqrt{70}/784$	$-\sqrt{105}/105$	$-11\sqrt{14}/5880$	$-3\sqrt{21}/980$	$-62\sqrt{10}/735$
$\bar\varepsilon\bar\varepsilon\varepsilon^+$	$25\sqrt{3}/252$	$-5\sqrt{105}/252$	$-\sqrt{70}/42$	$11\sqrt{21}/630$	$-\sqrt{14}/42$	$-2\sqrt{15}/63$
$\varepsilon^+\bar\varepsilon\bar\varepsilon - \bar\varepsilon\varepsilon^+\bar\varepsilon$	$\sqrt{3}/36$	$-\sqrt{105}/180$	$-\sqrt{70}/210$	$\sqrt{21}/30$	$-\sqrt{14}/14$	0
$\bar\varepsilon\bar3\varepsilon^+ - \bar3\bar\varepsilon\varepsilon^+$	$-5\sqrt{30}/336$	$-25\sqrt{42}/1008$	$-\sqrt{7}/21$	$-11\sqrt{210}/2520$	$-\sqrt{35}/420$	$-2\sqrt{6}/63$
$-\varepsilon^+\bar3\bar\varepsilon + \bar3\varepsilon^+\bar\varepsilon$	$-\sqrt{30}/240$	$-\sqrt{42}/144$	$\sqrt{7}/21$	$-\sqrt{210}/120$	$-\sqrt{35}/28$	0
$\varepsilon^+\bar\varepsilon\bar3 - \bar\varepsilon\varepsilon^+\bar3$	$\sqrt{30}/84$	$5\sqrt{42}/252$	0	$11\sqrt{210}/630$	$\sqrt{35}/105$	$-4\sqrt{6}/63$
$\bar3\bar3\varepsilon^+$	$-5\sqrt{2}/21$	0	0	0	$-\sqrt{21}/42$	$\sqrt{10}/7$
$\varepsilon^+\bar3\bar3 + \bar3\varepsilon^+\bar3$	$+4\sqrt{2}/21$	0	0	0	$\sqrt{21}/21$	$\sqrt{10}/28$
$4^+4^+\varepsilon^+$	$25\sqrt{66}/882$	$5\sqrt{2310}/882$	0	$\sqrt{462}/735$	$-\sqrt{77}/98$	$\sqrt{330}/147$
$\varepsilon^+4^+4^+ + 4^+\varepsilon^+4^+$	$2\sqrt{66}/441$	$2\sqrt{2310}/2205$	$-4\sqrt{385}/315$	$-26\sqrt{462}/6615$	$-\sqrt{77}/441$	$43\sqrt{330}/5292$
$\bar\varepsilon4^+\bar\varepsilon + 4^+\bar\varepsilon\bar\varepsilon$	$-5\sqrt{2}/144$	$-31\sqrt{70}/3600$	$\sqrt{105}/1575$	$17\sqrt{14}/600$	$5\sqrt{21}/24$	0
$\bar\varepsilon\bar\varepsilon4^+$	$-5\sqrt{2}/252$	$-31\sqrt{70}/6300$	$176\sqrt{105}/4725$	$-481\sqrt{14}/9450$	$-5\sqrt{21}/189$	$11\sqrt{10}/189$
$\bar34^+\bar2 - 4^+\bar3\bar2$	$-\sqrt{10}/36$	$\sqrt{14}/180$	$-4\sqrt{21}/315$	$\sqrt{70}/150$	$-2\sqrt{105}/42$	0
$-\bar\varepsilon4^+3^- + 4^+\bar\varepsilon3^-$	$5\sqrt{10}/63$	$-\sqrt{14}/63$	0	$-22\sqrt{70}/1575$	$-2\sqrt{105}/63$	$-25\sqrt{2}/252$
$\bar\varepsilon3^-4^+ - 3^-\bar\varepsilon4^+$	$-\sqrt{10}/63$	$+\sqrt{14}/315$	$-44\sqrt{21}/945$	$104\sqrt{70}/4725$	$-2\sqrt{105}/189$	$-55\sqrt{2}/756$
$\bar34^+3^- + 4^+\bar33^-$	$-\sqrt{110}/252$	$-\sqrt{154}/36$	0	$\sqrt{770}/450$	$\sqrt{1155}/315$	$-\sqrt{22}/63$
$\delta^+\bar34^+$	$\sqrt{110}/1260$	$\sqrt{154}/180$	$4\sqrt{231}/135$	$13\sqrt{770}/1350$	$-\sqrt{1155}/189$	$2\sqrt{22}/189$
$4^+4^+4^+$	$-\sqrt{1430}/588$	$17\sqrt{2002}/14700$	$4\sqrt{3003}/1575$	$-407\sqrt{10010}/110250$	$\sqrt{15015}/441$	$4\sqrt{286}/441$

Opérateurs à symetriser du type $[(22)(22)[2]\times(22)']\ (06+60)\delta^+$

Tableau II - 5 -

Triades	$(06+60)_3\, D_5^{0^+} = \frac{1}{\sqrt{17}} \times$	$(06+60)_3\, D_6^{0^+} = \frac{1}{\sqrt{73}} \times$	$(06+60)_3\, D_7^{0^+} = \frac{1}{\sqrt{17 \times 73}} \times$
$(0^+0^+0^+)$	0	$292\sqrt{210}/1125$	0
$(2^+2^+0^+)$ $(0^+2^+2^+)+(2^+0^+2^+)$	$16\sqrt{42}/315$	$-1\sqrt{42}/210$	$-8\sqrt{105}/105$
$(2^-2^-0^+)$ $(0^+2^-2^-)+(2^-0^+2^-)$	0	$-73\sqrt{42}/450$	0
$(3^-3^-0^+)$ $(0^+3^-3^-)+(3^-0^+3^-)$	$-2\sqrt{30}/45$	$58\sqrt{30}/225$	$-16\sqrt{3}/3$
$(4^+4^+0^+)$ $(0^+4^+4^+)+(4^+0^+4^+)$	$-2\sqrt{210}/63$	$-418\sqrt{210}/7875$	$-104\sqrt{21}/63$
$(2^+2^+2^+)$	$40\sqrt{42}/147$	$563\sqrt{42}/882$	$31\sqrt{105}/49$
$(2^+2^+4^+)$ $(2^+4^+2^+)+(4^+2^+2^+)$	$-106\sqrt{7}/245$	$194\sqrt{7}/245$	$-181\sqrt{70}/490$
$(2^-2^-2^+)$ $(2^+2^-2^-)+(2^-2^+2^-)$	$-4\sqrt{42}/63$	$-83\sqrt{42}/630$	$19\sqrt{105}/21$
$(2^-3^-2^+)-(3^-2^-2^+)$ $-(2^+3^-2^-)+(3^-2^+2^-)$ $(2^+2^-3^-)-(2^-2^+3^-)$	$-4\sqrt{105}/105$	$-8\sqrt{105}/315$	$1\sqrt{42}/7$
$(3^-3^-2^+)$ $(2^+3^-3^- + 3^-2^+3^-)$	$17\sqrt{7}/42$	0	0
$(4^+4^+2^+)$ $(2^+4^+4^+ + 4^+2^+4^+)$	$31\sqrt{231}/882$	$232\sqrt{231}/2205$	$50\sqrt{2310}/441$
$(2^-4^+2^- + 4^+2^-2^-)$ $(2^-2^-4^+)$	$10\sqrt{7}/63$	$-554\sqrt{7}/1575$	$-83\sqrt{70}/126$
$(3^-4^+2^-)-(4^+3^-2^-)$ $-(2^-4^+3^-)+(4^+2^-3^-)$ $2^-3^-4^+ - 3^-2^-4^+$	$-11\sqrt{35}/126$	$32\sqrt{35}/1575$	$95\sqrt{14}/63$
$3^-4^+3^- + 4^+3^-3^-$ $3^-3^-4^+$	$-2\sqrt{385}/315$	$-28\sqrt{385}/225$	$-1\sqrt{154}/9$
$4^+4^+4^+$	$2\sqrt{5005}/147$	$52\sqrt{5005}/18375$	$-11\sqrt{2002}/49$

Opérateurs symétriques du type $[(22)\otimes\{3\}]\ (06\pm60)_3\, 0^+$

TABLEAU II -6-

$$S_1 : \frac{1}{\sqrt{17}} [2\sqrt{14}/7 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \sqrt{3}/2 \quad 3\sqrt{70}/7]$$

$$S_2 : \frac{1}{\sqrt{73}} [\quad 0 \quad 2\sqrt{10} \quad -\sqrt{15} \quad -3\sqrt{2} \quad 0 \quad 0 \quad]$$

$$S_3 : \frac{1}{\sqrt{17\times73}} [\frac{73\sqrt{35}}{28} \quad \frac{-17}{4} \quad \frac{-68\sqrt{6}}{9} \quad \frac{85\sqrt{5}}{18} \quad \frac{-73\sqrt{30}}{18} \quad \frac{146\sqrt{7}}{63}]$$

Elles correspondent aux 3 opérateurs symétriques $D^{0^+}_{5,6,7}$ donnés par le tableau II-6 .

d) Opérateurs $[(22)\otimes\{3\}](44)_s D^{0^+}_{8,9,10}$.

Suivant le même principe la construction des 7 opérateurs constituants $(44)0^+$ à l'aide des tables des C.C.G. conduit aux résultats portés au tableau II-7.

Les conditions de symétrisation permettent de déterminer 14 équations avec lesquelles on peut définir un système homogène de 7 équations à 7 inconnues soluble par le programme CLEGA2. Celui-ci débute par une triangularisation qui met en évidence les équations proportionnelles ; il trouve que le système est 3 fois dégénéré montrant ainsi qu'il existe 3 combinaisons indépendantes $(44)_s 0^+$. Deux des 3 solutions arbitraires trouvées par le programme sont assez compliquées et on a préféré les déterminer directement en imposant les coefficients de certaines triades nuls.

On trouve alors les 3 combinaisons $\alpha_1 \ldots \alpha_7$ des 7 opérateurs constituants suivantes :

S_1 : 0 $\sqrt{35}/10$ $\sqrt{10}/5$ 0 0 $-1/2$ 0

S_2 : $\sqrt{77}/14$ 0 0 $-2\sqrt{21}/21$ 0 0 $-\sqrt{15}/6$

S_3 : $\sqrt{210}/84$ $\sqrt{6}/12$ $-1\sqrt{21}/9$ $\sqrt{770}/63$ $2\sqrt{6}/9$ $-\sqrt{210}/36$ $-\sqrt{22}/36$

Elles correspondent aux 3 opérateurs symétriques $D^{0^+}_{8,9,10}$ donnés par le tableau II-8.

e) Opérateurs $[(22)\otimes\{3\}](22)_s D^{0^+}_{11..15}$.

La construction des 11 opérateurs constituants $(22)0^+$ conduit aux résultats du tableau II-9. D'après ce qu'on a vu précédemment, puisqu'il existe 3 opérateurs $(44)0^+$, il doit exister 5 opérateurs $(22)0^+$. Les conditions de symétrisation permettent de définir parmi les 14 équations obtenues un système homogène de 11 équations à 11 inconnues soluble par CLEGA2. Celui-ci trouve effectivement que le système est 5 fois dégénéré montrant ainsi qu'il existe 5 combinaisons indépendantes $(22)_s 0^+$. La complexité ici devient telle que l'on a conservé les 5 solutions arbitraires orthonormées déterminées par le programme. Les 5 combinaisons $\alpha_1 \ldots \alpha_{11}$ des 11 opérateurs constituants sont alors :

	$S_1 = \frac{1}{3}\times$	$S_2 = \frac{\sqrt{6}}{3}\times$	$S_3 = \frac{\sqrt{157}}{157\times 3}\times$	$S_4 = \frac{\sqrt{29\times 157}}{29\times 157\times 3}\times$	$S_5 = \frac{\sqrt{29}\times}{29\times 3\times 3}$
α_1	$65\sqrt{35}/252$	0	$-125\sqrt{70}/72$	$-614\sqrt{35}/105$	$6\sqrt{3}$
α_2	$-13/36$	$1/2$	$175\sqrt{2}/72$	$-145/3$	0
α_3	$-13/36$	$-1/2$	$175\sqrt{2}/72$	$-145/3$	0
α_4	$-11\sqrt{35}/36$	0	$-151\sqrt{70}/72$	$4\sqrt{35}/3$	$6\sqrt{3}$
α_5	$-\sqrt{30}/6$	0	$-4\sqrt{15}/3$	$31\sqrt{30}/2$	$4\sqrt{14}$
α_6	$-\sqrt{105}/7$	0	0	$-157\sqrt{105}/21$	-16
α_7	$-\sqrt{6}/6$	0	$50\sqrt{3}/3$	$5\sqrt{6}/2$	$2\sqrt{70}$
α_8	0	-1	0	0	0
α_9	0	0	$-1\sqrt{42}/2$	$-325\sqrt{21}/21$	$10\sqrt{5}$
α_{10}	0	0	0	$-314\sqrt{210}/35$	$4\sqrt{2}$
α_{11}	0	0	0	0	-29

Elles conduisent aux 5 opérateurs symétriques $D^{0^+}_{10\ldots 15}$ donnés par le tableau II-10.

Finalement l'ensemble des 15 opérateurs appartenant au pléthysme $(22)\otimes\{3\}$ est reproduit par le tableau II-11.

$(44)0^+$	$(22)(22)$	$(22)'(22)$	$(06\pm60)(22)$	$(33)(22)$	$(14\pm41)(22)$	$(44)(22)_a$	$(44)(22)_b$
$0^+0^+0^+$	0	$-4\sqrt{35}/75$	$-8\sqrt{10}/75$	0	0	$4/15$	0
$2^+2^+0^+$	$-2\sqrt{5}/15$	0	$5\sqrt{2}/21$	0	0	$2\sqrt{5}/21$	0
$0^+2^+2^+ + 2^+0^+2^+$	$-1\sqrt{5}/21$	0	$5\sqrt{2}/42$	$-2\sqrt{165}/315$	$-2\sqrt{7}/21$	0	$1\sqrt{231}/63$
$2^-2^-0^+$	0	$2\sqrt{7}/15$	$-1\sqrt{2}/15$	0	0	$2\sqrt{5}/15$	0
$0^+2^-2^- + 2^-0^+2^-$	0	$-1\sqrt{7}/15$	$1\sqrt{2}/30$	0	0	$-\sqrt{5}/15$	0
$3^-3^-0^+$	$1\sqrt{7}/12$	$-7\sqrt{5}/60$	$4\sqrt{70}/105$	0	0	$\sqrt{7}/21$	0
$0^+3^-3^- + 3^-0^+3^-$	$-5\sqrt{7}/336$	$1\sqrt{5}/48$	0	$-1\sqrt{231}/63$	$-1\sqrt{5}/12$	$11\sqrt{7}/336$	$-1\sqrt{165}/144$
$4^+4^+0^+$	$5/12$	$7\sqrt{35}/300$	$4\sqrt{10}/175$	0	0	$3/35$	0
$0^+4^+4^+ + 4^+0^+4^+$	$5/112$	$1\sqrt{35}/400$	$11\sqrt{10}/1575$	$-5\sqrt{33}/189$	$1\sqrt{35}/252$	$-89/720$	$-23\sqrt{1155}/3024$
$2^+2^+2^+$	$13\sqrt{5}/196$	$25\sqrt{7}/588$	$25\sqrt{2}/84$	$-23\sqrt{165}/8[illegible]$	$-25\sqrt{7}/294$	0	$-5\sqrt{231}/441$
$2^+2^+4^+$	$-51\sqrt{30}/7840$	$15\sqrt{42}/1568$	0	$-5\sqrt{110}/294$	$-5\sqrt{42}/1176$	$-53\sqrt{30}/672$	$125\sqrt{154}/4704$
$2^+4^+2^+ + 4^+2^+2^+$	$-17\sqrt{30}/784$	$25\sqrt{42}/784$	$5\sqrt{3}/42$	$31\sqrt{110}/1470$	$3\sqrt{42}/392$	0	$-1\sqrt{154}/588$
$2^-2^-2^+$	$5\sqrt{5}/84$	$-5\sqrt{7}/84$	$25\sqrt{2}/84$	$1\sqrt{165}/126$	$5\sqrt{7}/42$	0	$1\sqrt{231}/63$
$2^+2^-2^- + 2^-2^+2^-$	$-1\sqrt{5}/12$	$1\sqrt{7}/12$	$-1\sqrt{2}/84$	0	$-1\sqrt{7}/14$	$-1\sqrt{5}/21$	0
$2^-3^-2^+ - 3^-2^-2^+$	$-5\sqrt{2}/112$	$-5\sqrt{70}/336$	$5\sqrt{5}/42$	$1\sqrt{66}/126$	$1\sqrt{70}/168$	0	$-1\sqrt{2310}/252$
$-2^+3^-2^- + 3^-2^+2^-$	$+1\sqrt{2}/16$	$+1\sqrt{70}/48$	$+1\sqrt{5}/42$	0	$-1\sqrt{70}/56$	$+5\sqrt{3}/84$	0
$2^+2^-3^- - 2^-2^+3^-$	$5\sqrt{2}/224$	$5\sqrt{70}/672$	0	$-2\sqrt{66}/63$	$-1\sqrt{70}/168$	$-55\sqrt{2}/672$	$5\sqrt{2310}/2016$
$3^-3^-2^+$	$-1\sqrt{30}/21$	0	0	$-1\sqrt{110}/28$	$5\sqrt{42}/84$	0	0
$2^+3^-3^- + 3^-2^+3^-$	$1\sqrt{30}/42$	0	0	$1\sqrt{110}/56$	$-5\sqrt{42}/168$	0	0
$4^+4^+2^+$	$5\sqrt{110}/294$	$5\sqrt{154}/294$	0	$-11\sqrt{30}/588$	$5\sqrt{154}/196$	0	$2\sqrt{42}/147$
$2^+4^+4^+ + 4^+2^+4^+$	$1\sqrt{110}/196$	$1\sqrt{154}/196$	$-1\sqrt{11}/126$	$215\sqrt{30}/10584$	$-1\sqrt{154}/3528$	$-5\sqrt{110}/252$	$-145\sqrt{42}/5292$
$2^-4^+2^- + 4^+2^-2^-$	$5\sqrt{30}/144$	$31\sqrt{42}/720$	$1\sqrt{3}/630$	0	$5\sqrt{42}/168$	$-17\sqrt{30}/1260$	0
$2^-2^-4^+$	$-5\sqrt{30}/672$	$-31\sqrt{42}/3360$	$22\sqrt{3}/945$	$5\sqrt{110}/378$	$-5\sqrt{42}/1512$	$-337\sqrt{30}/4320$	$-155\sqrt{154}/6048$
$3^-4^+2^- + 4^+3^-2^-$	$5\sqrt{6}/36$	$-1\sqrt{210}/180$	$-2\sqrt{15}/315$	0	$-1\sqrt{210}/84$	$-\sqrt{6}/63$	0
$-2^-4^+3^- + 4^+2^-3^-$	$+25\sqrt{6}/504$	$-\sqrt{210}/504$	0	$-25\sqrt{33}/504$	$+5\sqrt{210}/504$	$+11\sqrt{6}/504$	$-1\sqrt{770}/504$
$2^-3^-4^+ - 3^-2^-4^+$	$-5\sqrt{6}/168$	$1\sqrt{210}/840$	$-11\sqrt{15}/1890$	$-25\sqrt{22}/1512$	$-1\sqrt{210}/1512$	$7\sqrt{6}/216$	$-13\sqrt{70}/1512$
$3^-4^+3^- + 4^+3^-3^-$	$-5\sqrt{66}/2016$	$-1\sqrt{2310}/288$	0	$-11\sqrt{2}/126$	$-1\sqrt{2310}/504$	$-1\sqrt{66}/288$	$1\sqrt{70}/288$
$3^-3^-4^+$	$1\sqrt{66}/672$	$1\sqrt{2310}/480$	$1\sqrt{165}/270$	$5\sqrt{2}/189$	$-1\sqrt{2310}/1512$	$37\sqrt{66}/864$	$-5\sqrt{70}/864$
$4^+4^+4^+$	$-5\sqrt{858}/1568$	$17\sqrt{30030}/39200$	$1\sqrt{2145}/3150$	$10\sqrt{26}/441$	$1\sqrt{30030}/3528$	$-29\sqrt{858}/100800$	$47\sqrt{910}/19404$

Tableau II-7 - Opérateurs à 3 corps à symétriser du type $\{[(22)(22)](\lambda_{5'})\times(22)\}[44]0$

Triades	$[(22)\otimes\{3\}](44)_1$	$[(22)\otimes\{3\}](44)_2$	$[(22)\otimes\{3\}](44)_3$
$(0^+0^+0^+)$	$-8/15$	0	0
$(2^+2^+0^+)$ $(0^+2^+2^+)+(2^+0^+2^+)$	$\sqrt{5}/21$	$-1\sqrt{385}/105$	$-\sqrt{42}/21$
$(2^-2^-0^+)$ $(0^+2^-2^-)+(2^-0^+2^-)$	0	0	0
$(3^-3^-0^+)$ $(0^+3^-3^-)+(3^-0^+3^-)$	$-\sqrt{7}/168$	$1\sqrt{11}/24$	$-\sqrt{30}/24$
$(4^+4^+0^+)$ $(0^+4^+4^+)+(4^+0^+4^+)$	$71/840$	$5\sqrt{77}/168$	$\sqrt{210}/504$
$(2^+2^+2^+)$	$25\sqrt{5}/168$	$1\sqrt{385}/56$	$-25\sqrt{42}/392$
$(2^+2^+4^+)$ $(2^+4^+2^+)+(4^+2^+2^+)$	$31\sqrt{30}/672$	$-11\sqrt{2310}/3360$	$13\sqrt{7}/784$
$(2^-2^-2^+)$ $(2^+2^-2^-)+(2^-2^+2^-)$	$13\sqrt{5}/168$	$-1\sqrt{385}/168$	$-\sqrt{42}/168$
$(2^-3^-2^+)-(3^-2^-2^+)$ $-(2^+3^-2^+)+(3^-2^+2^-)$ $(2^+2^-3^-)-(2^-2^+3^-)$	$15\sqrt{2}/224$	$1\sqrt{154}/224$	$-\sqrt{105}/112$
$(3^-3^-2^+)$ $(2^+3^-3^-+3^-2^+3^-)$	0	0	0
$(4^+4^+2^+)$ $(2^+4^+4^+)+(4^+2^+4^+)$	$1\sqrt{110}/84$	$1\sqrt{70}/84$	$11\sqrt{231}/882$
$(2^-4^+2^-)+(4^+2^-2^-)$ $(2^-2^-4^+)$	$25\sqrt{30}/672$	$5\sqrt{2310}/2016$	$85\sqrt{7}/1008$
$(3^-4^+2^-)-(4^+3^-2^-)$ $-(2^-4^+3^-)+(4^+2^-3^-)$ $(2^-3^-4^+)-(3^-2^-4^+)$	$-\sqrt{6}/56$	$5\sqrt{462}/504$	$-\sqrt{35}/252$
$(3^-4^+3^-)+(4^+3^-3^-)$ $(3^-3^-4^+)$	$-1\sqrt{66}/96$	$\sqrt{42}/288$	$-\sqrt{385}/144$
$(4^+4^+4^+)$	$11\sqrt{858}/3360$	$-5\sqrt{546}/672$	$\sqrt{5005}/784$

Opérateurs à 3 corps fermioniques, symétriques et scalaires du type $[(22)\otimes\{3\}](44)\,0^+_S$

TABLEAU II-8-

$(22)\delta$	$(22)(22)_a$	$(22)(22)_b$	$(22)'(22)_a$	$(22)'(22)_b$	$(06\pm60)(22)$	$(33)(22)$	$(14\pm41)(22)_a$	$(14\pm41)(22)_b$	$(44)(22)$	$(11)(22)$	$(00)(22)$
$\overset{+}{0}\overset{+}{0}\overset{+}{0}$	0	0	0	$8/25$	$8\sqrt{42}/225$	0	0	0	$14\sqrt{15}/375$	0	$-1\sqrt{3}/9$
$\overset{+}{2}\overset{+}{2}\overset{+}{0}$	0	$4\sqrt{7}/35$	0	0	$-1\sqrt{210}/63$	0	0	0	$1\sqrt{3}/15$	0	$-1\sqrt{15}/9$
$\overset{+}{0}\overset{+}{2}\overset{+}{2}+\overset{+}{2}\overset{+}{0}\overset{+}{2}$	$2\sqrt{5}/35$	0	0	0	$1\sqrt{210}/210$	$-2\sqrt{15}/315$	$8\sqrt{42}/315$	$-2\sqrt{7}/35$	$11\sqrt{3}/90$	$2\sqrt{30}/45$	0
$\overset{-}{2}\overset{-}{2}\overset{+}{0}$	0	0	0	$-4\sqrt{5}/25$	$1\sqrt{210}/225$	0	0	0	$7\sqrt{3}/75$	0	$1\sqrt{15}/9$
$\overset{+}{0}\overset{-}{2}\overset{-}{2}+\overset{-}{2}\overset{+}{0}\overset{-}{2}$	0	0	0	$-2\sqrt{5}/25$	$-1\sqrt{210}/50$	0	0	0	$-7\sqrt{3}/50$	0	0
$\overset{-}{3}\overset{-}{3}\overset{+}{0}$	0	$-1\sqrt{5}/10$	0	$1\sqrt{7}/10$	$-4\sqrt{6}/45$	0	0	0	$1\sqrt{105}/150$	0	$1\sqrt{21}/9$
$\overset{+}{0}\overset{-}{3}\overset{-}{3}+\overset{-}{3}\overset{+}{0}\overset{-}{3}$	$-5\sqrt{7}/224$	$1\sqrt{5}/32$	$1\sqrt{5}/32$	$-1\sqrt{7}/32$	0	$1\sqrt{21}/21$	$-1\sqrt{30}/20$	$1\sqrt{5}/20$	$-11\sqrt{105}/600$	0	0
$\overset{+}{4}\overset{+}{4}\overset{+}{0}$	0	$-1\sqrt{35}/14$	0	$-7/50$	$-4\sqrt{42}/525$	0	0	0	$3\sqrt{15}/250$	0	$-1\sqrt{3}/3$
$\overset{+}{0}\overset{+}{4}\overset{+}{4}+\overset{-}{4}\overset{+}{0}\overset{+}{4}$	$125/672$	$1\sqrt{35}/96$	$1\sqrt{35}/96$	$49/2400$	$11\sqrt{42}/525$	$-11\sqrt{3}/63$	$1\sqrt{210}/84$	$1\sqrt{35}/28$	$383\sqrt{15}/9000$	0	0
$\overset{+}{2}\overset{+}{2}\overset{-}{2}$	$-39\sqrt{5}/490$	0	$-5\sqrt{7}/98$	0	$1\sqrt{210}/84$	$-23\sqrt{15}/882$	$10\sqrt{42}/441$	$-5\sqrt{7}/98$	$-11\sqrt{3}/126$	$-29\sqrt{30}/630$	0
$\overset{+}{2}\overset{+}{2}\overset{+}{4}$	$-85\sqrt{30}/3136$	$-17\sqrt{42}/2240$	$125\sqrt{42}/3136$	$1\sqrt{30}/64$	0	$-11\sqrt{10}/98$	$-15\sqrt{7}/196$	$-15\sqrt{42}/392$	$-29\sqrt{2}/560$	0	0
$\overset{+}{2}\overset{+}{4}\overset{+}{2}+\overset{+}{4}\overset{+}{2}\overset{+}{2}$	$51\sqrt{30}/1960$		$-15\sqrt{42}/392$	0	$1\sqrt{35}/70$	$31\sqrt{10}/1470$	$-3\sqrt{7}/245$	$9\sqrt{42}/1960$	$-11\sqrt{2}/280$	$-2\sqrt{5}/35$	0
$\overset{-}{2}\overset{-}{2}\overset{+}{2}$	$-1\sqrt{5}/14$	0	$1\sqrt{7}/14$	0	$1\sqrt{210}/84$	$1\sqrt{15}/126$	$-2\sqrt{42}/63$	$1\sqrt{7}/14$	$11\sqrt{3}/90$	$-1\sqrt{30}/18$	0
$\overset{+}{2}\overset{-}{2}\overset{-}{2}+\overset{-}{2}\overset{+}{2}\overset{-}{2}$	0	$-1\sqrt{7}/14$	0	$1\sqrt{5}/10$	$1\sqrt{210}/140$	0	0	$1\sqrt{7}/14$	$-1\sqrt{3}/10$	0	0
$\overset{-}{2}\overset{-}{3}\overset{+}{2}-\overset{-}{3}\overset{-}{2}\overset{+}{2}$	$3\sqrt{2}/56$	0	$1\sqrt{70}/56$	0	$1\sqrt{21}/42$	$1\sqrt{6}/126$	$-1\sqrt{105}/315$	$1\sqrt{70}/28$	$-11\sqrt{30}/360$	$2\sqrt{3}/9$	0
$\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{-}{2}+\overset{-}{3}\overset{+}{2}\overset{-}{2}$	0	$3\sqrt{70}/280$	0	$1\sqrt{2}/8$	$-1\sqrt{21}/14$	0	0	$1\sqrt{70}/56$	$1\sqrt{30}/40$	0	0
$\overset{+}{2}\overset{-}{2}\overset{-}{3}-\overset{-}{2}\overset{+}{2}\overset{-}{3}$	$15\sqrt{2}/448$	$-3\sqrt{70}/448$	$5\sqrt{70}/448$	$-5\sqrt{2}/64$	0	$2\sqrt{6}/21$	$-1\sqrt{105}/140$	$1\sqrt{70}/280$	$11\sqrt{30}/240$	0	0
$\overset{-}{3}\overset{-}{3}\overset{+}{2}$	$2\sqrt{30}/35$	0	0	0	0	$-1\sqrt{10}/28$	$-2\sqrt{7}/21$	$1\sqrt{42}/28$	0	$-1\sqrt{5}/15$	0
$\overset{+}{2}\overset{-}{3}\overset{-}{3}+\overset{-}{3}\overset{+}{2}\overset{-}{3}$	$1\sqrt{30}/28$	$-1\sqrt{42}/28$	0	0	0	$-3\sqrt{10}/56$	$-3\sqrt{7}/28$	$1\sqrt{42}/56$	0	0	0
$\overset{+}{4}\overset{+}{4}\overset{+}{2}$	$-1\sqrt{110}/49$	0	$-1\sqrt{154}/49$	0	0	$-1\sqrt{330}/588$	$-2\sqrt{231}/147$	$3\sqrt{154}/196$	$1\sqrt{66}/105$	$1\sqrt{165}/21$	0
$\overset{+}{2}\overset{+}{4}\overset{+}{4}+\overset{+}{4}\overset{+}{2}\overset{+}{4}$	$25\sqrt{110}/1176$	$1\sqrt{154}/168$	$25\sqrt{154}/1176$	$1\sqrt{110}/120$	$-1\sqrt{1155}/210$	$43\sqrt{330}/3528$	$-1\sqrt{231}/588$	$-1\sqrt{154}/392$	$11\sqrt{66}/630$	0	0
$\overset{-}{2}\overset{+}{4}\overset{-}{2}+\overset{+}{4}\overset{-}{2}\overset{-}{2}$	0	$5\sqrt{42}/168$	0	$31\sqrt{30}/600$	$-1\sqrt{35}/350$	0	0	$-5\sqrt{42}/168$	$-17\sqrt{3}/200$	0	0
$\overset{-}{2}\overset{-}{2}\overset{+}{4}$	$-125\sqrt{30}/4032$	$-5\sqrt{42}/576$	$-155\sqrt{42}/4032$	$-217\sqrt{30}/14400$	$22\sqrt{35}/525$	$11\sqrt{10}/126$	$-5\sqrt{7}/84$	$-5\sqrt{42}/168$	$675\sqrt{2}/3000$	0	0
$\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{2}-\overset{+}{4}\overset{-}{3}\overset{-}{2}$	0	$1\sqrt{210}/42$	0	$-1\sqrt{6}/30$	$2\sqrt{7}/35$	0	0	$1\sqrt{210}/84$	$-1\sqrt{10}/50$	0	0
$-\overset{+}{2}\overset{-}{4}\overset{-}{3}+\overset{+}{4}\overset{-}{2}\overset{-}{3}$	$25\sqrt{6}/336$	$-5\sqrt{210}/336$	$-1\sqrt{210}/336$	$1\sqrt{6}/48$	0	$25\sqrt{2}/168$	$1\sqrt{35}/28$	$-1\sqrt{210}/168$	$-11\sqrt{10}/300$	0	0
$\overset{-}{2}\overset{+}{3}\overset{+}{4}-\overset{-}{3}\overset{+}{2}\overset{+}{4}$	$-125\sqrt{6}/1008$	$-1\sqrt{210}/144$	$5\sqrt{210}/1008$	$7\sqrt{6}/720$	$-11\sqrt{7}/210$	$-55\sqrt{2}/504$	$-1\sqrt{35}/84$	$-1\sqrt{210}/168$	$47\sqrt{10}/900$	0	0
$\overset{-}{3}\overset{+}{4}\overset{-}{3}+\overset{+}{4}\overset{-}{3}\overset{-}{3}$	$-5\sqrt{66}/1344$	$1\sqrt{2310}/1344$	$-1\sqrt{2310}/192$	$7\sqrt{66}/192$	0	$1\sqrt{22}/42$	$-1\sqrt{385}/140$	$1\sqrt{2310}/840$	$7\sqrt{110}/1200$	0	0
$\overset{-}{3}\overset{-}{3}\overset{+}{4}$	$25\sqrt{66}/4032$	$1\sqrt{2310}/2880$	$5\sqrt{2310}/576$	$49\sqrt{66}/2880$	$1\sqrt{77}/30$	$1\sqrt{22}/63$	$-1\sqrt{385}/84$	$-1\sqrt{2310}/168$	$19\sqrt{110}/3600$	0	0
$\overset{+}{4}\overset{+}{4}\overset{+}{4}$	$-125\sqrt{858}/9408$	$-1\sqrt{30030}/1344$	$17\sqrt{30030}/9408$	$17\sqrt{858}/4800$	$1\sqrt{4004}/350$	$2\sqrt{286}/147$	$1\sqrt{5005}/196$	$1\sqrt{30030}/392$	$17\sqrt{1430}/4800$	0	0

TABLEAU II.9. Opérateurs à 3 corps à symétriser du type : $\{[(22)(22)](\lambda)_S\ (22)\}(22)0$

Triades	$[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{1}\delta^{+}$ $\frac{1}{3}\times$	$[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{2}\delta^{+}$ $\sqrt{\frac{5}{3}}\times$	$[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{3}\delta^{+}$ $\frac{1}{3\sqrt{157}}\times$	$[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{4}\delta^{+}$ $\frac{1}{3\sqrt{157\times 29}}\times$	$[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{5}\delta^{+}$ $\frac{1}{9\sqrt{29}}\times$
$(0^+\delta\delta^+)$	$-2\sqrt{35}/15$	0	$-326\sqrt{70}/375$	$2\sqrt{35}$	$9\sqrt{3}$
$(\hat{2}\hat{2}^+0^+)$ $(\hat{0}\hat{2}^+2^+)$ $(\hat{2}\hat{0}^+2^+)$	$4\sqrt{7}/105$	$2\sqrt{7}/35$	$52\sqrt{14}/105$	$-16\sqrt{7}$	$3\sqrt{15}$
$(2\bar{2}^-0^+)$ $(\delta 2^-2^+)$ $(2\delta^+2^-)$	$2\sqrt{7}/9$	0	$326\sqrt{14}/225$	$-10\sqrt{7}/3$	$-3\sqrt{15}$
$(5\bar{5}^-0^+)$ $(\delta 5^+5^-)$ $(5\delta^+5^-)$	$-4\sqrt{5}/45$	$-2\sqrt{5}/20$	$-1283\sqrt{10}/900$	$-14\sqrt{5}/3$	$-3\sqrt{21}$
$(4^+4^+0^+)$ $(\delta 4^+4^+)$ $(4^+0^+4^+)$	$8\sqrt{35}/105$	$-2\sqrt{35}/28$	$1391\sqrt{70}/10500$	$2\sqrt{35}$	$9\sqrt{3}$
$(2^+2^+2^+)$	$-65\sqrt{7}/588$	$15\sqrt{7}/196$	$937\sqrt{14}/588$	$841\sqrt{7}/28$	0
$(2^+2^+4^+)$ $(4^+2^+2^+)$ $(2^+4^+2^+)$	$11\sqrt{42}/490$	$7\sqrt{42}/3920$	$-1811\sqrt{21}/1960$	$29\sqrt{42}/7$	0
$(2\bar{2}^-2^+)$ (2^+2^-2) (2^-2^+2)	$-41\sqrt{7}/252$	$-3\sqrt{7}/28$	$-1531\sqrt{14}/1260$	$145\sqrt{7}/12$	0
$(2^+5^-2^+)-(5^-2^+2^+)$ $-(2^+5^-2^+)+(5^-2^+2^+)$ $(2^+2^-5)-(5^-2^+2^+)$	$-2\sqrt{70}/315$	$-\sqrt{70}/80$	$-659\sqrt{35}/2520$	$-29\sqrt{70}/6$	0
$(5^-5^-2^+)$ $(2^+5^-5^-)$ $(5^-2^+5^-)$	$29\sqrt{42}/252$	$-\sqrt{42}/28$	$-325\sqrt{21}/126$	$29\sqrt{42}/12$	0
$(4^+4^+2^+)$ $(2^+4^+4^+)$ $(4^+2^+4^+)$	$-5\sqrt{154}/588$	$-\sqrt{154}/196$	$-667\sqrt{77}/1470$	$-145\sqrt{154}/28$	0
$(2^-4^+2^-)$ $(4^+2^-2^-)$ $(2^+2^-4^+)$	$-11\sqrt{42}/126$	$5\sqrt{42}/112$	$-10519\sqrt{21}/12600$	0	0
$(5^-4^+2^-)-(4^+5^-2^-)$ $-(2^-4^+5^-)+(4^+2^-5^-)$ $(2^-5^-4^+)-(5^-2^-4^+)$	$-\sqrt{210}/126$	0	$314\sqrt{105}/1575$	0	0
$(5^-4^+5^-)$ $(4^+5^-5^-)$ $(5^-5^-4^+)$	$-4\sqrt{2310}/315$	$\sqrt{2310}/560$	$-3611\sqrt{1155}/12600$	0	0
$(4^+4^+4^+)$	$-2\sqrt{30030}/245$	$-3\sqrt{30030}/784$	$5809\sqrt{15015}/49000$	0	0

TABLEAU II-10- Opérateurs à 3 corps hermitiques, symétriques, scalaires du type $[(22)\otimes\{3\}](22)^{+}_{s}\delta^{+}$

$(22)\otimes\{3\}$	$0^+0^+0^+$	$2^+2^+0^+$ $0^+2^+2^+$ $2^+0^+2^+$	$2^-2^-0^+$ $0^+2^-2^-$ $2^-0^+2^-$	$3^-3^-0^+$ $0^+3^-3^-$ $3^-0^+3^-$	$4^+4^+0^+$ $0^+4^+4^+$ $4^+0^+4^+$	$2^+2^+2^+$	$2^+4^+2^+$ $4^+2^+2^+$ $2^+2^+4^+$
$(00)_S D^{0^+}_1$	0	$-\frac{1\sqrt{42}}{56}$	0	$\frac{1\sqrt{30}}{72}$	$\frac{5\sqrt{210}}{504}$	$\frac{13\sqrt{42}}{588}$	$-\frac{17\sqrt{7}}{392}$
$(00)'_S D^{0^+}_2$	$-\frac{2\sqrt{6}}{45}$	0	$\frac{1\sqrt{30}}{45}$	$-\frac{1\sqrt{42}}{72}$	$\frac{7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{5\sqrt{30}}{252}$	$\frac{5\sqrt{5}}{56}$
$(66)_S D^{0^+}_3$	$\frac{1\sqrt{10010}}{375}$	$\frac{1\sqrt{2002}}{210}$	$\frac{1\sqrt{2002}}{150}$	$\frac{1\sqrt{1430}}{300}$	$\frac{3\sqrt{10010}}{3500}$	$-\frac{\sqrt{2002}}{294}$	$-\frac{1\sqrt{3003}}{2940}$
$(88+88)_S D^{0^+}_4$	$\frac{8\sqrt{55}}{125}$	$-\frac{\sqrt{11}}{35}$	$\frac{7\sqrt{11}}{75}$	$-\frac{4\sqrt{385}}{525}$	$\frac{4\sqrt{55}}{2625}$	$\frac{\sqrt{11}}{14}$	$\frac{\sqrt{66}}{105}$
$(06+60)_S D^{0^+}_5 = \frac{1}{\sqrt{17}}\times$	0	$\frac{16\sqrt{42}}{315}$	0	$-\frac{2\sqrt{30}}{45}$	$-\frac{2\sqrt{210}}{63}$	$\frac{40\sqrt{42}}{147}$	$-\frac{106\sqrt{7}}{245}$
$(06+60)_S D^{0^+}_6 = \frac{1}{\sqrt{73}}\times$	$\frac{292\sqrt{210}}{1125}$	$-\frac{1\sqrt{42}}{210}$	$-\frac{73\sqrt{42}}{450}$	$\frac{58\sqrt{30}}{225}$	$-\frac{418\sqrt{210}}{7875}$	$\frac{253\sqrt{42}}{882}$	$\frac{194\sqrt{7}}{245}$
$(06+60)_S D^{0^+}_7 = \frac{1}{\sqrt{17\times73}}\times$	0	$-\frac{8\sqrt{105}}{105}$	0	$-\frac{16\sqrt{3}}{3}$	$-\frac{104\sqrt{21}}{63}$	$\frac{314 [illegible]}{49}$	$-\frac{181\sqrt{70}}{490}$
$(44)_S D^{0^+}_8 =$	$-\frac{8}{15}$	$\frac{\sqrt{5}}{21}$	0	$-\frac{\sqrt{7}}{168}$	$\frac{71}{840}$	$\frac{5\sqrt{5}}{168}$	$\frac{31\sqrt{30}}{672}$
$(44)_S D^{0^+}_9 =$	0	$-\frac{1\sqrt{385}}{105}$	0	$\frac{\sqrt{11}}{24}$	$\frac{5\sqrt{77}}{168}$	$\frac{\sqrt{385}}{56}$	$-\frac{11\sqrt{2310}}{3360}$
$(44)_S D^{0^+}_{10} =$	0	$-\frac{\sqrt{42}}{21}$	0	$-\frac{\sqrt{30}}{24}$	$\frac{\sqrt{210}}{504}$	$-\frac{25\sqrt{42}}{392}$	$\frac{13\sqrt{7}}{784}$
$(22)_S D^{0^+}_{11} = \frac{1}{3}\times$	$-\frac{2\sqrt{35}}{15}$	$\frac{4\sqrt{7}}{105}$	$\frac{2\sqrt{7}}{9}$	$-\frac{4\sqrt{5}}{45}$	$\frac{8\sqrt{35}}{105}$	$-\frac{65\sqrt{7}}{588}$	$\frac{11\sqrt{42}}{490}$
$(22)_S D^{0^+}_{12} = \sqrt{\frac{2}{3}}\times$	0	$\frac{2\sqrt{7}}{35}$	0	$-\frac{\sqrt{5}}{20}$	$-\frac{\sqrt{35}}{27}$	$\frac{15\sqrt{7}}{196}$	$\frac{52\sqrt{42}}{3920}$
$(22)_S D^{0^+}_{13} = \frac{1}{3\sqrt{157}}\times$	$-\frac{[illegible]}{378}$	$\frac{52\sqrt{14}}{105}$	$\frac{326\sqrt{14}}{225}$	$-\frac{1283\sqrt{10}}{900}$	$\frac{1391\sqrt{70}}{10500}$	$\frac{937\sqrt{14}}{588}$	$-\frac{181\sqrt{21}}{1960}$
$(22)_S D^{0}_{14} = \frac{1}{3\sqrt{157\times29}}$	$2\sqrt{35}$	$-16\sqrt{7}$	$-\frac{10\sqrt{7}}{3}$	$-\frac{14\sqrt{5}}{3}$	$2\sqrt{35}$	$\frac{841\sqrt{7}}{28}$	$\frac{29\sqrt{42}}{7}$
$(22)_S D^{0}_{15} = \frac{1}{9\sqrt{29}}$	$9\sqrt{3}$	$3\sqrt{15}$	$-3\sqrt{15}$	$-3\sqrt{21}$	$9\sqrt{3}$	0	0

$(22)\otimes\{3\}$	$2^-2^-2^+$ $2^+2^-2^-$ $2^-2^+2^-$	$2^-3^-2^+ - 3^-2^-2^+ - 2^+3^-2^- + 3^-2^+2^- + 2^+2^-3^- - 2^-2^+3^-$	$3^-3^-2^+$ $2^+3^-3^-$ $3^-2^+3^-$	$4^+4^+2^+$ $2^+4^+4^+$ $4^+2^+4^+$	$2^-4^+2^-$ $4^+2^-2^-$ $2^-2^-4^+$	$3^-4^+2^- - 4^+3^-2^- - 2^-4^+3^- + 4^+2^-3^- + 2^-3^-4^+ - 3^-2^-4^+$	$3^-4^+3^-$ $4^+3^-3^-$ $3^-3^-4^+$	$4^+4^+4^+$
$(00)_S D^{0^+}_1$	$\frac{5\sqrt{42}}{252}$	$-\frac{\sqrt{105}}{168}$	$-\frac{2\sqrt{7}}{21}$	$\frac{5\sqrt{231}}{441}$	$-\frac{25\sqrt{7}}{504}$	$-\frac{5\sqrt{35}}{126}$	$\frac{\sqrt{385}}{504}$	$-\frac{5\sqrt{5005}}{1176}$
$(00)'_S D^{0^+}_2$	$-\frac{\sqrt{30}}{30}$	$-\frac{5\sqrt{3}}{72}$	0	$\frac{1\sqrt{165}}{63}$	$-\frac{31\sqrt{5}}{360}$	$\frac{1}{18}$	$\frac{7\sqrt{11}}{72}$	$\frac{17\sqrt{143}}{840}$
$(66)_S D^{0^+}_3$	$\frac{1\sqrt{2002}}{210}$	$-\frac{1\sqrt{5005}}{420}$	0	$\frac{2\sqrt{91}}{245}$	$\frac{17\sqrt{3003}}{6300}$	$\frac{\sqrt{15015}}{1575}$	$-\frac{1\sqrt{1365}}{900}$	$-\frac{31\sqrt{105}}{24500}$
$(88+88)_S D^{0^+}_4$	$-\frac{1\sqrt{11}}{210}$	$\frac{2\sqrt{110}}{105}$	0	$-\frac{4\sqrt{2}}{105}$	$\frac{11\sqrt{66}}{1575}$	$-\frac{8\sqrt{330}}{1575}$	$\frac{2\sqrt{30}}{225}$	$\frac{2\sqrt{390}}{1125}$
$(06+60)_S D^{0^+}_5$	$-\frac{\sqrt{42}}{63}$	$-\frac{4\sqrt{105}}{105}$	$\frac{17\sqrt{7}}{42}$	$\frac{31\sqrt{231}}{882}$	$\frac{10\sqrt{7}}{63}$	$-\frac{11\sqrt{35}}{126}$	$-\frac{2\sqrt{385}}{315}$	$\frac{2\sqrt{5005}}{147}$
$(06+60)_S D^{0^+}_6$	$-\frac{83\sqrt{42}}{630}$	$-\frac{8\sqrt{105}}{315}$	0	$\frac{232\sqrt{231}}{2205}$	$-\frac{554\sqrt{7}}{[illegible]}$	$\frac{52\sqrt{35}}{1575}$	$-\frac{28\sqrt{385}}{225}$	$\frac{52\sqrt{5005}}{[illegible]}$
$(06+60)_S D^{0^+}_7$	$\frac{19\sqrt{105}}{21}$	$\frac{1\sqrt{42}}{7}$	0	$\frac{50\sqrt{231}}{441}$	$-\frac{83\sqrt{70}}{175}$	$\frac{95\sqrt{14}}{63}$	$-\frac{1\sqrt{154}}{9}$	[illegible]
$(44)_S D^{0^+}_8$	$\frac{13\sqrt{5}}{168}$	$\frac{15\sqrt{2}}{224}$	0	[illegible]	$\frac{25\sqrt{30}}{672}$	$-\frac{\sqrt{6}}{56}$	$-\frac{\sqrt{66}}{36}$	$\frac{11\sqrt{858}}{[illegible]}$
$(44)_S D^{0^+}_9$	$-\frac{1\sqrt{385}}{168}$	$\frac{\sqrt{154}}{224}$	0	$\frac{\sqrt{70}}{84}$	$\frac{5\sqrt{2310}}{2016}$	$\frac{5\sqrt{462}}{504}$	$\frac{\sqrt{42}}{288}$	$\frac{5\sqrt{546}}{672}$
$(44)_S D^{0^+}_{10}$	$-\frac{\sqrt{42}}{168}$	$-\frac{\sqrt{105}}{112}$	0	$\frac{11\sqrt{231}}{882}$	$\frac{85\sqrt{7}}{[illegible]}$	$-\frac{\sqrt{35}}{252}$	$-\frac{\sqrt{385}}{144}$	$\frac{[illegible]}{784}$
$(22)_S D^{0^+}_{11}$	$-\frac{4\sqrt{7}}{252}$	$-\frac{2\sqrt{70}}{315}$	$\frac{24\sqrt{42}}{252}$	$-\frac{5\sqrt{154}}{588}$	$-\frac{11\sqrt{42}}{[illegible]}$	$-\frac{\sqrt{210}}{126}$	$-\frac{4\sqrt{231}}{315}$	$-\frac{2[illegible]}{245}$
$(22)_S D^{0^+}_{12}$	$-\frac{3\sqrt{7}}{28}$	$-\frac{\sqrt{70}}{80}$	$\frac{1\sqrt{42}}{27}$	$-\frac{[illegible]}{196}$	[illegible]	0	$\frac{\sqrt{2310}}{540}$	$-\frac{3\sqrt{3003}}{784}$
$(22)_S D^{0^+}_{13}$	$-\frac{1531\sqrt{14}}{1260}$	$-\frac{659\sqrt{35}}{2520}$	$-\frac{325\sqrt{21}}{126}$	$-\frac{667\sqrt{77}}{1470}$	$-\frac{10519\sqrt{21}}{12600}$	$\frac{314\sqrt{105}}{1575}$	$-\frac{3611\sqrt{1155}}{12600}$	$\frac{5809\sqrt{15015}}{49000}$
$(22)_S D^{0}_{14}$	$\frac{145\sqrt{7}}{12}$	$-\frac{29\sqrt{70}}{6}$	$\frac{29\sqrt{42}}{13}$	$-\frac{145\sqrt{154}}{[illegible]}$	[illegible]	[illegible]	0	0
$(22)_S D^{0}_{15}$	0	0	0	0	0	0	0	0

Tableau II-11-

Ensemble des 15 opérateurs à 3 particules orthonormés, scalaires, symétriques et hermitiques du type $[(22)\otimes\{3\}]$

C) Conclusions à propos de la détermination des opérateurs à 3 particules.

L'ensemble des 34 opérateurs électrostatiques à 3 particules scalaires, hermitiques et symétriques, représentant les effets des interactions de configurations lointaines sur les configurations $(d+s)^n$ sont donnés par l'ensemble des tableaux II-1-2-3-11.

Nous donnons ci-dessous le tableau récapitulatif de la classification des opérateurs obtenus.

N° du Tableau	Nombre et type général des opérateurs	Classification SU_3
II-1	7 opérateurs du type $[(11)\otimes\{2\}](22)$	(00),4(22),(06±60),(44)
II-2	10 " $[(22)\otimes\{2\}](11)$	(00),5(22),2(06±60),2(44)
II-3	2 " $[(11)\otimes\{3\}]$	(00),(22)
II-11	15 " $[(22)\otimes\{3\}]$	2(00),5(22),3(06±60),3(44),(28+82),(66)

La construction de ces opérateurs a montré que les C.C.G. déterminés dans la 1ère partie de ce chapitre ont facilité la détermination d'opérateurs hermitiques et symétriques et dans les cas les plus complexes tels que $[(22)\otimes\{3\}]\begin{matrix}(44)\\(22)\end{matrix}$ ont permis d'expliciter au mieux le problème posé.

Le nombre élevé des opérateurs obtenus montre qu'une étude préalable est encore nécessaire avant de pouvoir les introduire dans une étude physique de façon, par exemple, à éliminer les opérateurs proportionnels à des interactions à 1 ou 2 particules déjà introduites dans les calculs ; cependant, il est vraisemblable qu'il en reste encore trop et que des critères doivent être trouvés pour estimer ceux d'importance prépondérante. On peut imaginer des procédés empiriques mais systématiques consistant par exemple à ajuster par petits groupes les paramètres à l'expérience.

D'autre part, l'étude complète de $(d+s)^n$ dans le schéma SU_3 nécessite de connaître soit les coefficients de parenté fractionnelle SU_3 , soit de connaître le développement des états $(d+s)^n$ classés de SU_3 en fonction des états de Racah standards d^n , $d^{n-1}s$, $d^{n-2}s^2$. Nous avons effectivement déterminé ces développements nécessaires aux études physiques ultérieures prévues, mais nous ne les avons pas inclus dans ce mémoire.

PLAN CHAPITRE III

Classification des intéractions de second ordre de structure hyperfine dans les configurations d^N.

I) Position du problème - Rappels thèse Cl. Bauche

1°) Effets des intéractions de configurations sur la structure hyperfine

2°) Expression des opérateurs effectifs dans le cas du terme croisé énergie coulombienne - structure hyperfine

3°) Discussion des résultats obtenus pour d^N par les méthodes usuelles - Intérêt de la classification des intéractions étudiées par la théorie des groupes.

II) Utilisation de la chaîne de réductions $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$ pour l'étude de d^N.

A) Rappels sur la classification des états des configurations d^N et des opérateurs monoélectroniques.

B) Classification formelle des intéractions biélectroniques intervenant dans notre étude

1°) Opérateurs symétriques

2°) Détermination des opérateurs intervenant explicitement dans les corrections $\Delta_q, \Delta_\ell, \Delta_{ss}$.

III) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $SO_5 \supset R_3$

1°) Construction des systèmes linéaires

2°) Détermination des coefficients

Choix des solutions dans les cas dégénérés

a) Comparaison des coefficients $(u_1\ u_2)$, $(u_2\ u_1)$ et des carrés Kronecker

b) Vérifications des coefficients et tableaux des résultats.

IV) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$

1°) Construction des systèmes linéaires

2°) Détermination des coefficients

a) Cas de l'échange $(\sigma_1\ \sigma_2)$, $(\sigma_2\ \sigma_1)$ et des carrés Kronecker

b) Vérifications des coefficients et tableaux des résultats

V) Classification des opérateurs biélectroniques

A) Opérateurs biélectroniques

1°) Etude des opérateurs couplés en (xk) = (02) intervenant dans Δ_q

2°) Etude des opérateurs couplés en (xk) = (01) intervenant dans Δ_ℓ

3°) Etude des opérateurs couplés en (xk) = (12) intervenant dans $\Delta_{\ell C}$

B) Etude des corrections Δ

CHAPITRE III

Classification des intéractions de second ordre de structure hyperfine dans les configurations d^N.

I. Position du problème

1°) Effets des intéractions de configurations sur la structure hyperfine

Nous avons rappelé, dans le chapitre I, les termes qui apparaissent dans la correction δE sur l'énergie de structure hyperfine lorsqu'on tient compte du deuxième ordre de perturbation et nous ne nous intéressons ici qu'au terme croisé $QH_{hfs} + H_{hfs} Q$, considéré comme prépondérant pour les configurations étudiées. Cette approximation est valable pour les configurations suffisamment proches du couplage LS c'est-à-dire pour lesquelles les intéractions électrostatiques sont nettement supérieures aux intéractions de spin-orbite.

Si X_1 et X_2 sont deux états de la configuration ℓ^N étudiée et X un état de la configuration perturbatrice, la correction à $\langle X_1 | H_{hfs} | X_2 \rangle$ est donnée par l'expression

$$- \sum_X \frac{\langle X_1|Q|X\rangle\langle X|H_{hfs}|X_2\rangle}{\Delta E} - \sum_X \frac{\langle X_1|H_{hfs}|X\rangle\langle X|Q|X_2\rangle}{\Delta E}$$

où ΔE est la différence positive des énergies des deux configurations.

Soit $\underset{\sim}{T}^{xk} = \sum_i \underset{\sim}{t}_i^{xk}$ l'opérateur de structure hyperfine considéré, où $\underset{\sim}{t}_i^{xk}$ est un opérateur agissant sur l'électron i $\left(= \frac{\ell_i}{r^3} \text{ ou } -\frac{\sqrt{10}\,C_i}{r^3} \text{ ou } \frac{C_i^2}{r^3}\right)$

L'intéraction de configurations a pour effet de remplacer les éléments de matrice de $\underset{\sim}{T}^{xk}$ par $(1+\Delta) \langle X_1 | T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle$ avec

$$\Delta = -\sum_X \frac{\langle X_1 | T^{xk}_{\pi q} | X \rangle \langle X | Q | X_2 \rangle}{\langle X_1 | T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle \Delta E} - \sum_X \frac{\langle X_1 | Q | X \rangle \langle X | T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle}{\langle X_1 | T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle \Delta E}$$

ou encore, a pour effet de remplacer la quantité $\langle r^{-3} \rangle$ par $(1 + \Delta)\langle r^{-3} \rangle$

Soit $\langle r^{-3} \rangle_\ell = (1+\Delta_\ell)\langle r^{-3} \rangle$, $\langle r^{-3} \rangle_{\Delta C} = (1+\Delta_{\Delta C})\langle r^{-3} \rangle$, $\langle r^{-3} \rangle_q = (1+\Delta_q)\langle r^{-3} \rangle$

Les résultats expérimentaux confirment qu'il est nécessaire d'introduire trois paramètres pour interpréter la structure hyperfine d'un terme LS donné. Les facteurs Δ dépendent des termes de la configuration étudiée et de la configuration perturbatrice introduite.

Nous considérerons ici le cas le plus intéressant étudié par Cl.Bauche correspondant aux excitations d'un électron nl vers une couche vide.

$$(n\ell)^N \rightarrow (n\ell)^{N-1}\, n'\ell'$$

et notamment les excitations pour lesquelles $\ell' = \ell$ qui seules introduisent la correction Δ_ℓ.

2°) <u>Opérateurs effectis de structure hyperfine</u>

Suivant la méthode de B.R. Judd (1967) dans l'étude de la structure hyperfine des configurations $2p^N$, Cl. Bauche a défini un opérateur effectif $\underset{\sim}{X}^{xk}$ agissant sur les mêmes électrons que $\underset{\sim}{T}^{xk}$ et que l'on ajoute à $\underset{\sim}{T}^{xk}$ pour reproduire l'effet de l'intéraction de configurations, soit

$$(1+\Delta)\langle X_1 | T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle = \langle X_1 | X^{xk}_{\pi q} + T^{xk}_{\pi q} | X_2 \rangle$$

Pour l'excitation considérée elle a trouvé comme forme générale de l'opérateur $\underset{\sim}{X}^{xk}$

$$X^{xk} = -\sqrt{2}\,\langle s\ell \| t^{xk} \| s\ell\rangle \frac{1}{\sqrt{[L]}} \sum_{i\neq j} \sum_{tk'} v_t \sqrt{\frac{[k']}{[t]}} \left\{(-1)^k + (-1)^{k'}\right\} \begin{Bmatrix} t & k' & k \\ \ell & \ell' & \ell \end{Bmatrix} \left\{W_i^{xk'} W_j^{ot}\right\}^{xk}$$

avec

$$v_t = \sum_{n'} \langle \ell \| c^t \| \ell'\rangle \langle \ell \| c^t \| \ell\rangle R^t(n\ell\, n\ell, n\ell\, n'\ell') \frac{\langle n\ell \| r^{-3} C^k \| n'\ell'\rangle}{\langle n\ell \| r^{-3} C^k \| n\ell\rangle} \quad \frac{1}{\Delta E(n\ell\, n'\ell')}$$

L'expression ci-dessus ne diffère de celle donnée par Cl. Bauche dans sa thèse que par l'utilisation des doubles tenseurs W_i^{xk} au lieu des doubles tenseurs unitaires U_i^{xk}. Ils sont simplement reliés par

$$W_i^{xk} = \sqrt{[x][k]}\, U_i^{xk}$$

On obtient pour $\Delta^{xk} = \dfrac{\langle X_1 | X^{xk} | X_2\rangle}{\langle X_1 | T^{xk} | X_2\rangle}$ l'expression suivante :

$$\Delta^{xk} = -\sqrt{2} \sum_{tk'} v_t \sqrt{\frac{[k']}{[t]}} \left\{(-1)^k + (-1)^{k'}\right\} \begin{Bmatrix} t & k' & k \\ \ell & \ell' & \ell \end{Bmatrix} \frac{\sum_{i\neq j} \langle X_1 \| \{W_i^{xk'} W_j^{ot}\}^{xk} \| X_2\rangle}{\langle X_1 \| W^{xk} \| X_2\rangle} \qquad (1)$$

La formule ci-dessous obtenue par Cl. Bauche relie entre eux les résultats correspondant aux termes de deux configurations conjuguées :

$$\Delta\left[(n\ell)^N \to (n\ell)^{N-1} n'\ell';\, \alpha SL\right] + \Delta\left[(n\ell)^{4\ell+2-N} \to (n\ell)^{4\ell+1-N} (n'\ell');\, \alpha SL\right] =$$

$$2(-1)^k \sum_t v_t \begin{Bmatrix} \ell & t & \ell \\ \ell & k & \ell \end{Bmatrix} + \delta(\ell\ell') \frac{2}{2\ell+1} \sum_t x_t - \frac{4}{5} v_2\, \delta(x,0)\, \delta(k,2)$$

où $$x_t = \sum_{n'} \langle \ell \| c^t \| \ell\rangle^2 R^t(n\ell, n\ell, n\ell, n'\ell') \frac{\langle n\ell | r^{-3} | n'\ell\rangle}{\langle n\ell | r^{-3} | n\ell\rangle} \quad \frac{1}{\Delta E(n\ell, n'\ell')} \qquad (2)$$

La suivante relie les termes de plus haute multiplicité pour une même valeur de L des configurations $(n\ell)^N$ et $(n\ell)^{2\ell+1-N}$ $(N < 2\ell+1)$

$$\Delta\left[(n\ell)^N \to (n\ell)^{N-1} n'\ell';\, S_m L\right] + \Delta\left[(n\ell)^{2\ell+1-N} \to (n\ell)^{2\ell-N} n'\ell';\, S'_m L\right] = \qquad (3)$$

$$2(-1)^k \sum_t v_t \begin{Bmatrix} \ell & t & \ell' \\ \ell & k & \ell \end{Bmatrix} + \delta(\ell\ell') \frac{2}{2\ell+1} \sum_t x_t - \frac{2}{5} v_2\, \delta(k,2)$$

TABLE 2. CORRECTION FACTORS FOR THE EXCITATION
$(nd)^N \rightarrow (nd)^{N-1}\, n'd$

configuration	term	Δ_i	$\Delta_s C$	$\Delta_i - \Delta_s C$	Δ_q	$\Delta_q - \Delta_s C$
d	^{2}D	0	0	0	0	0
d^2	^{3}P	$-14b+\frac{14}{5}c$	$-14b+\frac{14}{5}c$	0	$-14b+\frac{14}{5}c$	0
	^{3}F	$16b+\frac{14}{5}c$	$16b+\frac{14}{5}c$	0	$16b+\frac{14}{5}c$	0
d^3	^{4}P	$56b+\frac{28}{5}c$	$8b+\frac{28}{5}c$	$48b$	$8b+\frac{28}{5}c$	0
	^{4}F	$26b+\frac{28}{5}c$	$-22b+\frac{28}{5}c$	$48b$	$-22b+\frac{28}{5}c$	0
d^4	^{5}D	$42b+\frac{42}{5}c$	$-6b+\frac{42}{5}c$	$48b$	$-6b+\frac{42}{5}c$	0
d^5	all	$21b+\frac{21}{5}c$	$-3b+\frac{21}{5}c+\frac{1}{2}\delta$	$24b-\frac{1}{2}\delta$	not defined	not defined
d^6	^{5}D	0	δ	$-\delta$	$-\delta$	-2δ
d^7	^{4}P	$-14b+\frac{14}{5}c$	$-14b+\frac{14}{5}c+\delta$	$-\delta$	$-14b+\frac{14}{5}c-\delta$	-2δ
	^{4}F	$16b+\frac{14}{5}c$	$16b+\frac{14}{5}c+\delta$	$-\delta$	$16b+\frac{14}{5}c-\delta$	-2δ
d^8	^{3}P	$56b+\frac{28}{5}c$	$8b+\frac{28}{5}c+\delta$	$48b-\delta$	$8b+\frac{28}{5}c-\delta$	-2δ
	^{3}F	$26b+\frac{28}{5}c$	$-22b+\frac{28}{5}c+\delta$	$48b-\delta$	$-22b+\frac{28}{5}c-\delta$	-2δ
d^9	^{2}D	$42b+\frac{42}{5}c$	$-6b+\frac{42}{5}c+\delta$	$48b-\delta$	$-6b+\frac{42}{5}c-\delta$	-2δ

TABLE 4. CORRECTION FACTORS FOR THE EXCITATIONS $d^N \rightarrow d^{N-1}s$ AND $s^2d^N \rightarrow sd^{N+1}$ FOR THE TERMS OF HIGHEST MULTIPLICITY OF d^N

	$d^N \rightarrow d^{N-1}s$		$s^2d^N \rightarrow sd^{N+1}$	
configurations	$\Delta_s C$	Δ_q	$\Delta_s C$	Δ_q
d, d^2, d^3, d^4	0	0	$\frac{2}{5}y_2$	$-\frac{2}{5}y_2$
d^5	$\frac{1}{5}v_2$	not defined	$\frac{1}{5}y_2$	not defined
d^6, d^7, d^8, d^9	$\frac{2}{5}v_2$	$-\frac{2}{5}v_2$	0	0

TABLE 6. CORRECTION FACTORS FOR THE EXCITATION $d^N \rightarrow d^{N-1}g$

configuration	term	$\Delta_s C$	Δ_q
d	^{2}D	0	0
d^2	^{3}P	0	0
	^{3}F	$-25v_2'' + 5v_4''$	$-25v_2'' + 5v_4''$
d^3	^{4}P	$-30v_2'' + 6v_4''$	$-30v_2'' + 6v_4''$
	^{4}F	$-5v_2'' + v_4''$	$-5v_2'' + v_4''$
d^4	^{5}D	$-30v_2'' + 6v_4''$	$-30v_2'' + 6v_4''$
d^5	all	$6v_2'' + 3v_4''$	not defined
d^6	^{5}D	$42v_2''$	$-42v_2''$
d^7	^{4}P	$42v_2''$	$-42v_2''$
	^{4}F	$17v_2'' + 5v_4''$	$-67v_2'' + 5v_4''$
d^8	^{3}P	$12v_2'' + 6v_4''$	$-72v_2'' + 6v_4''$
	^{3}F	$37v_2'' + v_4''$	$-47v_2'' + v_4''$
d^9	^{2}D	$12v_2'' + 6v_4''$	$-72v_2'' + 6v_4''$

Tableau I : Tables extraites de la thèse de Cl. Bauche-Arnoult

3°) Résultats obtenus pour les configurations d^N par les méthodes usuelles et but de l'étude proposée

Un résultat important de Cl. Bauche a été de mettre en évidence des relations permettant de relier les effets de l'intéraction de configurations lointaines pour les termes de Hund et pour les termes de plus haute multiplicité d'une même série. Les tables 2-4-6 extraites de la thèse de Cl. Bauche montrent les valeurs des corrections Δ obtenues pour les configurations d^N. Les relations remarquables sont les suivantes :

a) pour les configurations d^2 (ℓ^2) les résultats Δ_ℓ, Δ_{sc}, Δ_q sont indépendants de xk.

b) pour la première demi-couche $\Delta_{sc} = \Delta_q$

c) pour la demi-couche d^5 un Δ donné est le même pour tous les termes de la configuration.

d) pour les termes de Hund $\Delta_\ell - \Delta_{sc}$ est le même pour les paires (d, d^2) (d^3, d^4) (d^6, d^7) (d^8, d^9).

e) cette relation reste vraie pour les termes de plus haute multiplicité.

Les relations b) et c) ont été expliquées par Cl. Bauche à l'aide de considérations sur les états de spin des fonctions monoélectroniques et à l'aide de la relation (2) sur les propriétés de symétrie concernant la demi-couche.

Les autres restaient impliquées.

Or, ces relations sont importantes du fait qu'actuellement les mesures de structures hyperfines ne portent encore que sur les termes de Hund et sur les termes de plus haute multiplicité. Elles permettent de confronter théorie et expérience de façon précise et d'avoir ainsi des tests sur l'importance que peuvent avoir les effets des intéractions des configurations lointaines.

Elles permettent en effet de comparer les structures hyperfines des éléments voisins sans connaître en détail les parties radiales.

Le but de notre étude est de déterminer la classification des intéractions effectives de second-ordre de structure hyperfine à l'aide de la théorie des groupes.

Nous avons vu dans le chapitre I que les états des configurations d^N et les opérateurs monoélectroniques W_i^{xk} peuvent être classés suivant la chaine de réduction $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$ (4)
Les corrections Δ sont exprimées dans la formule (1) en fonction d'opérateurs biélectroniques $(W_i^{x_1 k_1} \; W_j^{x_2 k_2})^{\underline{xk}}$ qui ne possèdent des propriétés de transformations bien définies que dans les opérations de $SU_2 \times R_3$.

Nous savons donc à priori que la classification des opérateurs biélectroniques dans la chaine de réductions (4) donnera une meilleure description des intéractions étudiées qui s'exprimeront alors en fonction d'opérateurs mettant en évidence des propriétés de symétrie beaucoup plus élevées que les groupes SU_2 et R_3.

Nous savons aussi que les calculs explicites des intéractions seront beaucoup plus simples grâce à l'utilisation du théorème de Wigner-Eckart qui permet d'obtenir facilement les éléments de matrices si l'on a calculé les coefficients de Clebsch-Gordan nécessaires.

II. Etude de d^N à l'aide de la chaine de groupes $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$

Nous avons vu dans le chapitre I que les états des configurations d^N et les opérateurs monoélectroniques W_i^{xk} sont définis généralement à l'aide de la chaîne de réductions

$$U_{10} \supset Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3) \qquad (4')$$

Le but de notre étude est de symétriser les intéractions biélectroniques qui interviennent dans les corrections Δ . On veut donc définir des opérateurs à 2 particules ayant des propriétés de transformation bien définies dans les opérations des groupes considérés.

Un opérateur biélectronique T_{ij}^{xk} se transformant comme $|\sigma x U r k\rangle$ s'écrit :

$$\left[\sigma x u r k\right] T_{ij}^{xk} = \sum_{\substack{x_1 u_1 k_1 \\ x_2 u_2 k_2}} (\sigma_1 x_1 u_1 k_1, \sigma_2 x_2 u_2 k_2 | \sigma x u r k) \left(W_i^{x_1 k_1} W_j^{x_2 k_2} \right)^{xk} \qquad (5)$$

$$= \sum_{\substack{x_1 u_1 k_1 \\ x_2 u_2 k_2}} \langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 | \sigma x u \rangle (u_1 k_1 + u_2 k_2 | u r k) \left\{ \left[\sigma_1 u_1 r_1 \right] W_i^{x_1 k_1} \left[\sigma_2 u_2 r_2 \right] W_j^{x_2 k_2} \right\}^{xk}$$

d'après le théorème de factorisation de Racah

Cette expression fait intervenir les coefficients de Clebsch-Gordan du groupe Sp_{10} dans ses réductions successives au groupe R_3. Nous avons vu au chapitre I comment se calculent les coefficients dans une chaine de réductions. Nous devons donc, pour réaliser explicitement le changement de base d'opérateurs biélectroniques défini par (5), déterminer d'abord les coefficients de $SO_5 \supset R_3$: $\langle u_1 k_1 + u_2 k_2 | u r k \rangle$ nécessaires, puis ceux de $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$: $\langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 | \sigma x u \rangle$ en fonction des précédents.

A) Rappels sur la classification des états d^N et des opérateurs monoélectroniques

Le principe de la classification des états de configurations d'électrons équivalents a été rappelé au chapitre I et nous avons simplement porté dans le tableau II la classification obtenue pour les états des configurations d^N suivant la chaine de réduction utilisée (4').

De même nous avons porté dans le tableau (III) la classification des doubles tenseurs monoélectroniques W_i^{xk} (dd).

n	U_{10}	Sp_{10}	$SU_2 \times SO_5 \supset R_3$	U_{10}	n
d°	$\{0\}$	$<0>$	$(00)^1S$	$\{1^\circ\} \equiv 1^{10}$	d^{10}
d^1	$\{1\}$	$<1>$	$(10)^2$ D	$\{1^1\} \equiv \{1^9\}$	d^9
d^2	$\{1^2\}$	$<1^2>$	$(11)^3F, {}^3P$ $(20)^1G,$ D	$\{1^2\} \equiv \{1^8\}$	d^8
		$<0>$	$(00)^1S$		
d^3	$\{1^3\}$	$<1^3>$	$(11)^4F, {}^4P$ $(21)^2H,G,F,D,P$	$\{1^3\} = \{1^7\}$	d^7
		$<1>$	$(10)^2D$		
d^4	$\{1^4\}$	$<1^4>$	$(10)^5D$ $(21)^3H,G,F,D,P$ $(22)^1$ I,G,F,D,S	$\{1^4\} = \{1^6\}$	d^6
		$<1^2>$	$(11)^3$ F,P $(20)^1$ G,D		
		$<0>$	$(00)^1$ S		
d^5	$\{1^5\}$	$<1^5>$	$(00)^6S$ $(20)^4G,D$ $(22)^2$ I,G,F,D,S		
		$<1^3>$	$(11)^4$ F,P $(21)^2$ H,G,F,D,P		
		$<1>$	$(10)^2$ D		

Tableau II

U_{10}	Sp_{10}	$SU_2 \times SO_5$	$SU_2 \times R_3$
$\{21^8 0\}$	$<2>$	$^3(20)$	$W^{12}(dd)$, $W^{14}(dd)$
		$^3(00)$	$W^{10}(dd)$
		$^1(11)$	$W^{01}(dd)$, $W^{03}(dd)$
	$<1^2>$	$^3(11)$	$W^{11}(dd)$, $W^{13}(dd)$
		$^1(20)$	$W^{02}(dd)$, $W^{04}(dd)$
$\{0\}$	$<0>$	$^1(00)$	$W^{00}(dd)$

Tableau III

B) Classification formelle des intéractions biélectroniques intervenant dans notre étude

1°) Opérateurs symétriques

L'ensemble des opérateurs monoélectroniques W^{xk} se transforment dans le groupe Sp_{10} comme les représentations $[<2> + <1^2> + <0>]$

On sait qu'alors les opérateurs symétriques à deux particules construits à partir des W^{xk} se transforment comme les représentations de Sp_{10} apparaissant dans le pléthysme

$$[<2>+<1^2>+<0>]\otimes\{2\} = <2>\otimes\{2\} + <1^2>\otimes\{2\} + <0>\otimes\{2\} + <2><1^2> + <1^2><0> + <2><0>$$

Le développement des différentes parties de cette expression donne

$$<2>\otimes\{2\} = <0> + <1^2> + <2^2> + <4> \qquad (a)$$

$$<1^2>\otimes\{2\} = <0> + <1^2> + <2^2> + <1^4> \qquad (b)$$

$$<0>\otimes\{2\} = 0$$

$$<2><1^2> = <1^2> + <2> + <21^2> + <31> \qquad (c)$$

$$<1^2><0> = <1^2>$$

$$<2><0> = <2>$$

- Les produits de Kronecker $\sigma_1 \times \sigma_2$ de deux états quelconques de d^N ne contiennent jamais dans leur développement les représentations $\langle 31 \rangle$ et $\langle 4 \rangle$. Les éléments de matrice des opérateurs biélectroniques se transformant comme $\langle 31 \rangle$ et $\langle 4 \rangle$ sont donc nuls quels que soient les états considérés. Ils n'interviennent pas dans les corrections Δ et en principe nous n'avons pas besoin de les calculer. Cependant, il est commode de pouvoir exprimer complètement le changement de base faisant passer de la description par les opérateurs couplés $\left\{ W_i^{x_1 k_1} \; W_j^{x_2 k_2} \right\}^{xk}$ à celle des opérateurs classés.

- Les opérateurs $\langle 0 \rangle \otimes \{2\}$, $\langle 1^2 \rangle \langle 0 \rangle$, $\langle 2 \rangle \langle 0 \rangle$ sont en fait des opérateurs monoélectroniques et nous ne nous intéresserons donc qu'aux opérateurs apparaissant dans les développements a) b) et c) c'est-à-dire correspondant au pléthysme $\left[\langle 2 \rangle + \langle 1^2 \rangle \right] \otimes \{2\}$

- Les réductions à $SU_2 \times SO_5$ nécessaires sont données par Wybourne et Butler (1970) sauf celles correspondant à $\langle 21^2 \rangle$, $\langle 2^2 \rangle$, $\langle 31 \rangle$ et $\langle 40 \rangle$ que nous avons déterminées à partir des réductions des $\langle 1^N \rangle$ et des produits de Kronecker dans les groupes Sp_{10} et SO_5. Nous avons trouvé :

$$\langle 21^2 \rangle = {}^1[(11) + (21) + (31)] + {}^3[(20) + (22) + (31) + (10) + (11) + (21)] + {}^5[(11) + (21)]$$

$$\langle 2^2 \rangle = {}^1[(00) + (10) + (20) + (22) + (40)] + {}^3[(11) + (20) + (21) + (31)] + {}^5[(00) + (20) + (22)]$$

$$\langle 4 \rangle = {}^1[(00) + (20) + (22)] + {}^3[(11) + (20) + (31)] + {}^5[(00) + (20) + (40)]$$

$$\langle 31\rangle = {}^{1}\left[(11) + (20) + (21) + (31)\right]$$
$$+ {}^{3}\left[(00) + 2(11) + 2(20) + (21) + (22) + (31) + (40)\right]$$
$$+ {}^{5}\left[(11) + (20) + (31)\right]$$

- Les réductions $SO_5 \supset R_3$ nécessaires figurent toutes dans le livre de Wybourne et Butler (1970).

Nous ne nous intéressons en fait qu'aux opérateurs biélectroniques $(xk_1, ok_2)\, xk$ avec (x,k) = (0,1), (0,2) ou (1,2) intervenant dans les expressions Δ_ℓ, Δ_q, Δ_{sc}.

Mais nous verrons que les formules de vérifications des coefficients de Clebsch-Gordan calculés, nécessitent de connaître l'ensemble des coefficients pour toutes les valeurs de xk apparaissant pour un ensemble $(\sigma_1\, \sigma_2)\, \sigma U$ donné et nous n'avons pas limité dans les calculs les valeurs des (x, k).

De même, les opérateurs classés $[\sigma x u k]$ font intervenir dans leur développement des opérateurs $\left[W^{x_1 k_1}\, W^{x_2 k_2}\right]^{xk}$ avec x_1k_1, x_2k_2 ne répondant pas aux restrictions imposées par Δ_ℓ, Δ_q, Δ_{sc} mais pour les mêmes raisons nous ne limitons pas non plus dans les calculs les valeurs de $x_1k_1x_2k_2$.

2°) <u>Détermination des opérateurs intervenant dans les corrections $\Delta_q, \Delta_\ell, \Delta_{sc}$ suivant les propriétés d'hermiticité</u>

D'après ce que nous avons vu au chapitre I, si nous utilisons la convention d'Edmonds pour définir "l'hermiticité des opérateurs tensoriels" nous pouvons dire que les W^{xk} de départ sont "hermitiques" si x + k pair, nous les notons + et sont "antihermitiques" si x + k impair, nous les notons-

Nous avons donc $\langle 1^2\rangle\ {}^1(20)\ W^{02}$ +
W^{04} +
$\langle 1^2\rangle\ {}^3(11)\ W^{11}$ +
W^{13} +
et $\langle 2\rangle\ {}^1(11)\ W^{01}$ -
W^{03} -
${}^3(00)\ W^{10}$ -
${}^3(20)\ W^{12}$ -
W^{14} -

Les opérateurs biélectroniques vérifient alors :

$\langle 2\rangle \otimes \{2\}$ du type (--) c'est-à-dire "hermitique" donc de type + au total

$\langle 1^2\rangle \otimes \{2\}$ du type (++) c'est-à-dire "hermitique" donc de type + au total

$\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle$ du type (-+) c'est-à-dire "antihermitique" donc de type -

Or si nous considérons $\Delta_\ell(01)$ x + k impair donc Δ_ℓ est du type -
$\Delta_{\delta c}(12)$ " " donc $\Delta_{\delta c}$ est du type -
$\Delta_q(02)$ " pair donc Δ_q est du type +

On en déduit immédiatement que seuls les opérateurs biélectroniques classés venant du produit $\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle$ interviennent dans Δ_ℓ et $\Delta_{\delta c}$

Ceux venant de $\begin{cases}\langle 2\rangle \otimes \{2\}\\ \langle 1^2\rangle \otimes \{2\}\end{cases}$ interviennent seulement dans Δ_q

III) Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $[SO_5 \supset R_3]$

1°) Construction des systèmes linéaires

D'après ce que nous venons de voir la classification des opérateurs biélectroniques par rapport à $Sp_{10} \supset SU_2$ ($SO_5 \supset R_3$) nécessite la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan qui définissent les transformations linéaires suivantes :

$$|(u_i u_j)\, u\, zk\rangle = \sum_{k_i k_j} \langle u_i k_i + u_j k_j \,|\, u\, zk\rangle \; |u_i k_i, u_j k_j, k\rangle$$

où $u_i k_i$ et $u_j k_j$ sont les représentations de SO_5 et R_3 apparaissant dans la classification des opérateurs monoélectroniques W_i^{xk}, soit (11) 1, 3 et (20) 2,4 et où u sont les représentations apparaissant dans les produits de Kronecker

$$(11)(11) = (00) + (10) + (11) + (20) + (21) + (22)$$

$$(11)(20) = (11) + (20) + (21) + (31)$$

$$(20)(11) = (11) + (20) + (21) + (31)$$

$$(20)(20) = (00) + (11) + (20) + (22) + (31) + (40)$$

L'opérateur de Casimir du groupe SO_5 pour les configurations d^N s'exprime en fonction des générateurs du groupe, V^1 (dd) et V^3 (dd), par la formule

$$G_{SO_5} = \frac{1}{3}\left[V^1 (dd).\ V^1 (dd) + V^3 (dd).\ V^3 (dd)\right]$$

Les représentations irréductibles (u) de SO_5 sont caractérisées par leur poids le plus haut $(u_1 u_2)$ et les valeurs propres de l'opérateur G sont données par l'expression

$$G (u) = \frac{1}{6}\left[u_1 (u_1 + 3) + u_2 (u_2 + 1)\right]$$

Notons que $V^1 (dd) = \frac{1}{\sqrt{10}} L$ et que $V^k = \sqrt{[k]}\ u^k$

Nous pouvons écrire alors :

$$G_{SO_5} - \frac{1}{30} L^2 = \frac{1}{3} V^3 . V^3$$

et suivant la méthode décrite dans le chapitre I nous trouvons que les coefficients des transformations linéaires cherchées sont définis par les équations :

$$\left[G (u) - G(u_1) - G(u_2) - \frac{1}{30} k (k + 1) + \frac{1}{30} k_1 (k_1 + 1) + \frac{1}{30} k_2 (k_2 + 1)\right]$$

$$\langle u_1 k_1 + u_2 k_2 \mid u\ \ k\rangle$$

$$+ \frac{14}{3} \sum_{k'_1 k'_2} (-1)^{k'_1 + k_2 + k + 1} \begin{Bmatrix} k'_1 & k'_2 & k \\ k_2 & k_1 & 3 \end{Bmatrix} \langle u_1 k_1 \| U^3 \| u_1 k'_1 \rangle \langle U_2 k_2 \| U^3 \| U_2 k'_2 \rangle x$$

$$\langle u_1 k'_1 + U_2 k'_2 \mid u\ \tau\ k\rangle = 0 \quad (6)$$

Pour les cas considérés il n'apparait pas de dégénérescence externe et les seuls cas de dégénérescence interne qui interviennent sont

$(11)(20) \longrightarrow (31)\ 3,3'\ 5,5'$ et $(20)(20) \longrightarrow (31)\ 3,3'\ 5,5'$

Nous n'avons donc introduit dans les notations des équations (6) que l'indice ξ repérant les valeurs de k qui apparaissent plusieurs fois dans la réduction $SO_5 \supset R_3$.

Les éléments de matrice réduits de U^3 sont tabulés dans les tables de Nielson et Koster (1963) pour les représentations intervenant dans la classification des états d^N comme c'est le cas pour (11) et (20).
Nous avons donc à notre disposition les données nécessaires à la construction des systèmes linéaires par valeurs de $(u_1 u_2)\ u\ \xi L$ données, construction réalisée par le programme CLEGA 1.

2°) Détermination des coefficients

Une fois les systèmes linéaires construits, une première série de solution pour $(u_1 u_2) \equiv (11)(11)$, $(11)(20)$, $(20)(20)$ a été obtenue à l'aide du programme CLEGA 2, solutions qui dépendent d'un choix arbitraire de phase pour chaque système $(u_1 u_2)\ u\ \xi k$ traité et d'un choix arbitraire de solutions orthonormées pour les cas dégénérés cités plus haut. On sait qu'en fait le choix est beaucoup plus restreint si l'on s'impose les conditions suivantes :

- le calcul des éléments de matrice réduits de U^3, pour une représentation u donnée, à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordan obtenus pour un ensemble $(u_i u_j)u$ donné, doit redonner le même résultat en valeur et en signe que les cas déjà calculés pour un autre ensemble $(u'_i u'_j)u$, ou que les cas déjà tabulés dans le livre de Nielson et Koster.

Le calcul des éléments de matrice de U^3 permet une vérification des coefficients calculés et impose une relation de phase entre les différents systèmes correspondant à une représentation (u) donnée.

- le même principe appliqué aux cas de dégénérescence interne apparaissant dans plusieurs produits de Kronecker impose que les différents choix de combinaisons linéaires soient compatibles.

Ainsi, dans notre étude les solutions $\left[(11)(20)\right]$ (31) 3,3' et $\left[(11)(20)\right]$(31)5,5' ont été choisies arbitrairement et ont imposé les valeurs de $\langle (31)\tau k \| U^3 \| (31)\tau' k' \rangle$ alors que les solutions $\left[(20)(20)\right]$ (31) 3,3' et $\left[(20)(20)\right]$ (31) 5,5' fournies par CLEGA 2 ont été combinées linéairement de façon à retrouver les mêmes éléments de matrice de U^3.

Dans tous les cas les éléments de matrice de U^3 sont calculés à l'aide de la formule :

$$\langle (u_1u_2)\, U\tau k \,\|\, U^k \,\|\, (u_1u_2)\, U\tau' k' \rangle =$$

$$\sum_{\substack{k_1k_2\\k'_1k'_2}} \langle U_1k_1 + U_2k_2 \,|\, U\tau k\rangle \langle U_1k'_1 + U_2k'_2 \,|\, U\tau' k'\rangle \sqrt{[k][k']}\ (-1)^k$$

$$\left[\delta(\psi_2\psi'_2)(-1)^{k_1+k_2+k'} \begin{Bmatrix} k & \kappa & k' \\ k'_1 & k_2 & k_1 \end{Bmatrix} \langle u_1 k_1 \| U^\kappa \| u_1 k'_1\rangle \right. \qquad (7)$$

$$\left. + \delta(\psi_1\psi'_1)(-1)^{k'_1+k'_2+k} \begin{Bmatrix} k & \kappa & k' \\ k'_2 & k_1 & k_2 \end{Bmatrix} \langle u_2 k_2 \| U^\kappa \| u_2 k'_2\rangle \right]$$

a) <u>Comparaison des cas (u_1u_2) et (u_2u_1) et cas des carrés Kronecker</u>

- Echangeons les indices 1 et 2 dans la formule donnant les coefficients des systèmes (6). On obtient la même phase pour les coefficients diagonaux. Pour les coefficients non diagonaux on obtient la différence $(-1)^{k_1+k_2+k'_1+k'_2}$

On en déduit donc que $\langle u_2\tau_2 k_2 + u_1\tau_1 k_1 \,|\, u\tau k\rangle = (-1)^{k_1+k_2} \langle u_1\tau_1 k_1 + u_2\tau_2 k_2 \,|\, u\tau k\rangle$

(Pour les cas qui nous intéressent (11) 1,3 et (20) 2,4 on a toujours k_1+k_2 pair).

En fait, on sait que pour u donnée il reste un choix arbitraire de phase pour chaque valeur de k.

On utilise alors le calcul de U^3 pour imposer des choix compatibles de phase pour les systèmes $(u_1)(u_2)$ et $(u_2)(u_1)$.

Echangeons les indices 1 et 2 dans la formule (7)

On trouve que la différence de phase est $(-1)^{k + k'}$

On en déduit qu'on a au total la relation habituelle de l'échange de deux indices dans le groupe R_3 soit :

$$\langle u_2 \tau_2 k_2 + u_1 \tau_1 k_1 \mid u \tau k \rangle = (-1)^{k_1 + k_2 + k} \langle u_1 \tau_1 k_1 + u_2 \tau_2 k_2 \mid u \tau k \rangle \quad (10)$$

- Supposons que u_1 et u_2 soient la même représentation.

Dans le cas des carrés Kronecker les u se séparent en u symétriqueset u antisymétriques suivant respectivement les pléthysmes $u_i \otimes \{2\}$ et $u_i \otimes \{1^2\}$

Donc si on échange 1 et 2 nous trouvons deux cas :

- <u>u symétriques</u>

L'échange des représentations u de SO_5 ne doit rien changer

L'échange en R_3 donne $(-1)^{k_1+k_2} + k$ soit au total

$$\langle u_1^1 k_1 + u_2^1 k_2 \mid \lambda_S k \rangle = (-1)^{k_1 + k_2 + k} \langle u_2^1 k_2 + u_1^1 k_1 \mid \lambda_S k \rangle \quad (11)$$

- <u>u antisymétriques</u>

L'échange en SO_5 doit donner -1

L'échange en R_3 doit donner $(-1)^{k_1 + k_2 + k}$ soit au total

$$\langle u_1^1 k_1 + u_2^1 k_2 \mid \lambda_a k \rangle = (-1)^{k_1+k_2+k+1} \langle u_2^1 k_2 + u_1^1 k_1 \mid \lambda_a k \rangle \quad (12)$$

On peut rendre l'ensemble des formules (10) (11) et (12) compatibles en posant

$$\boxed{\langle u_1 \tau_1 k_1 + u_2 \tau_2 k_2 \mid u \tau k \rangle = (-1)^{k_1+k_2+ k+p} \langle u_2 \tau_2 k_2 + u_1 \tau_1 k_1 \mid u \tau k \rangle}$$

- avec si $u_1 = u_2$ $\quad p = 0$ si u_S
  $\quad p = 1$ si U_a
- avec si $u_1 \neq u_2$ $\quad p$ arbitraire $= 0$

b) Vérifications par le calcul des valeurs propres de l'opérateur de Casimir et Tableaux des résultats

Le calcul des éléments de matrice réduits de U^3, à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordan des différents ensembles $(u_i u_j)u$, représente une étape de vérifications suffisante si les $\langle u\tau k \| U^3 \| u\tau' k' \rangle$ sont tabulés dans le livre de Nielson et Koster. Cependant, pour les représentations U qui n'apparaissent pas dans la classification des états d^N nous devons vérifier les éléments eux-mêmes.

On utilise pour cela la relation qui existe entre les valeurs propres de l'opérateur de Casimir du groupe SO_5 pour une représentation u donnée et les éléments $\langle u\tau k \| U^3 \| u\tau' k' \rangle$

On a en effet les relations suivantes :

$$\langle u\tau kq | G | u\tau kq \rangle = G(u) = (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k & o & k \\ -q & o & q \end{pmatrix} \langle uk \| G \| uk \rangle \quad \text{soit}$$

$$\langle u\tau kq | G | u\tau kq \rangle = G(u) = \frac{1}{\sqrt{[k]}} \langle uk \| G \| uk \rangle \quad \text{et}$$

$$\langle u\tau k \| G \| u\tau k \rangle = \langle u\tau k \| \frac{1}{30} L^2 + \frac{7}{3} U^3 . U^3 \| u\tau k \quad \text{soit au total}$$

$$G(u) = \frac{1}{30} k(k+1) + \frac{7}{3[k]} \sum_{k''} \langle u\tau k \| U^3 \| u\tau'' k'' \rangle \langle u\tau'' k'' \| U^3 \| u\tau k \rangle (-1)^{k+k''} \quad (13)$$

On vérifie, notamment pour les représentations (31) et (40) que l'application de la formule (13) sur les résultats donnés dans les tables VI redonne bien les valeurs propres de l'opérateur G.

L'ensemble des résultats du calcul des coefficients de Clebsch-Gordan $SO_5 \supset R_3$ qui nous intéressent ici est donné dans les tables V .

TABLEAU V

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SU5>R3

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE (11)(11)

K=0	[(00) 0>	[(22) 0>
<(11)1 +(11)1 J	1(30)/10	-1(70)/10
<(11)3 +(11)3 J	1(70)/10	1(30)/10

K=1	[(11) 1>	[(21) 1>
<(11)1 +(11)1 J	1(15)/15	1(210)/15
<(11)3 +(11)3 J	1(210)/15	-1(15)/15

K=2	[(10) 2>	[(20) 2>	[(21) 2>	[(22) 2>
<(11)1 +(11)1 J	2(1)/5	1(7)/5	0	1(14)/5
<(11)1 +(11)3 J	1(14)/10	-2(2)/5	1(2)/2	1(1)/5
<(11)3 +(11)1 J	1(14)/10	-2(2)/5	-1(2)/2	1(1)/5
<(11)3 +(11)3 J	-1(14)/5	-1(2)/5	0	3(1)/5

κ=3	[(11) 3>	[(21) 3>	[(22) 3>
<(11)1 +(11)3]	1(10)/5	1(10)/10	-1(2)/2
<(11)3 +(11)1]	1(10)/5	1(10)/10	1(2)/2
<(11)3 +(11)3]	-1(5)/5	2(5)/5	0

κ=4	[(20) 4>	[(21) 4>	[(22) 4>
<(11)1 +(11)3]	1(30)/15	-1(2)/2	1(330)/30
<(11)3 +(11)1]	1(30)/15	1(2)/2	1(330)/30
<(11)3 +(11)3]	1(165)/15	0	-2(15)/15

κ=5	[(21) 5>
<(11)3 +(11)3]	1(1)/1

κ=6	[(22) 6>
<(11)3 +(11)3]	-1(1)/1

TABLEAU V

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SO5>R3

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE (11)(20)

K=1	[(11) 1>	[(21) 1>	[(31) 1>
<(11)1 +(20)2]	1(3)/3	1(15)/15	-1(15)/5
<(11)3 +(20)2]	-2(42)/21	11(210)/210	-1(210)/70
<(11)3 +(20)4]	1(14)/7	1(70)/14	1(70)/14

K=2	[(20) 2>	[(21) 2>	[(31) 2>
<(11)1 +(20)2]	1(3)/5	1(10)/5	-2(3)/5
<(11)3 +(20)2]	-8(7)/35	-1(210)/35	-9(7)/35
<(11)3 +(20)4]	3(70)/35	-1(21)/7	-1(70)/35

K=3	[(11) 3>	[(21) 3>	[(31) 3>	[(31)3'>
<(11)1 +(20)2]	-2(2)/7	2(35)/35	-3(210)/70	1(66)/14
<(11)1 +(20)4]	1(5)/7	1(105)/14	-1(70)/28	-3(22)/28
<(11)3 +(20)2]	-1(2)/7	1(35)/10	1(210)/20	1(66)/28
<(11)3 +(20)4]	1(33)/7	0	0	4(1)/7

κ=4	[(20) 4>	[(21) 4>	[(31) 4>
<(11)1 +(20)4]	1(10)/5	1(5)/10	1(55)/10
<(11)3 +(20)2]	1(14)/7	3(7)/14	-1(77)/14
<(11)3 +(20)4]	1(385)/35	-1(770)/35	-1(70)/35

κ=5	[(21) 5>	[(31) 5>	[(31)5'>
<(11)1 +(20)4]	-1(30)/10	0	1(70)/10
<(11)3 +(20)2]	1(7)/7	1(39)/7	1(3)/7
<(11)3 +(20)4]	1(2730)/70	-1(10)/7	3(130)/70

κ=6	[(31) 6>
<(11)3 +(20)4]	1(1)/1

κ=7	[(31) 7>
<(11)3 +(20)4]	1(1)/1

TABLEAU V

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SO5>R3

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE (20)(20)

K=0	[(00)0 >	[(22)0 >
<(20)2 +(20)2]	1(70)/14	3(14)/14
<(20)4 +(20)4]	3(14)/14	-1(70)/14

K=1	[(11)1 >	[(31)1 >
<(20)2 +(20)2]	1(7)/7	-1(42)/7
<(20)4 +(20)4]	1(42)/7	1(7)/7

K=2	[(20)2 >	[(22)2 >	[(31)2 >	[(40)2 >
<(20)2 +(20)2]	-1(15)/21	-3(2)/7	0	-2(56)/21
<(20)2 +(20)4]	4(3)/21	1(10)/7	-1(2)/2	-1(330)/42
<(20)4 +(20)2]	4(3)/21	1(10)/7	1(2)/2	-1(330)/42
<(20)4 +(20)4]	1(330)/21	-1(11)/7	0	2(3)/21

K=3	[(11)3 >	[(22)3 >	[(31)3 >	[(31)3'>
<(20)2 +(20)2]	-3(7)/49	0	3(2)/14	3(770)/98
<(20)2 +(20)4]	3(70)/49	1(2)/2	3(5)/14	1(77)/98
<(20)4 +(20)2]	3(70)/49	-1(2)/2	3(5)/14	1(77)/98
<(20)4 +(20)4]	3(77)/49	0	-2(22)/14	6(70)/98

K=4	[(20)4 >	[(22)4 >	[(31)4 >	[(40)4 >
<(20)2 +(20)2]	4(15)/63	4(11)/21	0	1(2145)/63
<(20)2 +(20)4]	5(56)/63	1(10)/42	1(2)/2	-2(78)/63
<(20)4 +(20)2]	5(56)/63	1(10)/42	-1(2)/2	-2(78)/63
<(20)4 +(20)4]	1(429)/63	-2(55)/21	0	20(3)/63

K=5	[(31)5 >	[(31)5'>	[(40)5 >
<(20)2 +(20)4]	-1(25)/14	5(2)/14	-1(2)/2
<(20)4 +(20)2]	-1(25)/14	5(2)/14	1(2)/2
<(20)4 +(20)4]	12(1)/14	2(13)/14	0

K=5	[(22)6 >	[(31)6 >	[(40)6 >
<(20)2 +(20)4]	-1(7)/7	1(2)/2	1(70)/14
<(20)4 +(20)2]	-1(7)/7	-1(2)/2	1(70)/14
<(20)4 +(20)4]	1(35)/7	0	1(14)/7

K=7	[(31)7 >
<(20)4 +(20)4]	1(1)/1

K=8	[(40)8 >
<(20)4 +(20)4]	1(1)/1

$\langle uL \| u^3 \| uL' \rangle$ pour $u \equiv (20), (11), (22), (21)$

u^3	(20) D	(20) G
(20) D	$-8/7$	$3\sqrt{10}/7$
(20) G	$3\sqrt{10}/7$	$3\sqrt{11}/7$

u^3	(11) P	(11) F
(11) P	0	$1\sqrt{30}/5$
(11) F	$1\sqrt{30}/5$	$-1\sqrt{15}/5$

u^3	(22) S	(22) D	(22) F	(22) G	(22) I
(22) S	0	0	$2\sqrt{14}/7$	0	0
(22) D	0	$2/7$	$5\sqrt{21}/14$	$3\sqrt{55}/14$	0
(22) F	$-2\sqrt{14}/7$	$-5\sqrt{21}/14$	$-\sqrt{15}/10$	$3\sqrt{7}/14$	$-3\sqrt{1365}/70$
(22) G	0	$3\sqrt{55}/14$	$-3\sqrt{7}/14$	$-69\sqrt{11}/154$	$-3\sqrt{143}/22$
(22) I	0	0	$3\sqrt{1365}/70$	$-3\sqrt{143}/22$	$-2\sqrt{1430}/55$

u^3	(21) P	(21) D	(21) F	(21) G	(21) H
(21) P	0	$-2\sqrt{15}/7$	$1\sqrt{105}/70$	$-9\sqrt{3}/14$	0
(21) D	$2\sqrt{15}/7$	$-3/7$	$-1\sqrt{210}/14$	$1\sqrt{6}/14$	$-1\sqrt{66}/7$
(21) F	$1\sqrt{105}/70$	$1\sqrt{210}/14$	$3\sqrt{15}/10$	$1\sqrt{231}/14$	$-1\sqrt{231}/14$
(21) G	$9\sqrt{3}/14$	$1\sqrt{6}/14$	$-1\sqrt{231}/14$	$-3\sqrt{11}/14$	$-1\sqrt{429}/14$
(21) H	0	$1\sqrt{66}/7$	$-1\sqrt{231}/14$	$1\sqrt{429}/14$	0

TABLEAU VI

$\langle uL \| u^3 \| u'L' \rangle$ pour $u \equiv (40)$ et (31)

u^3	(40)D	(40)G	(40)H	(40)I	(40)L
(40)D	$29/14$	$3\sqrt{13}/7$	$9\sqrt{7}/14$	0	0
(40)G	$3\sqrt{13}/7$	$-48\sqrt{11}/77$	$3\sqrt{21}/7$	$3\sqrt{66}/11$	0
(40)H	$-9\sqrt{7}/14$	$-3\sqrt{21}/7$	$1\sqrt{429}/14$	$-1\sqrt{273}/7$	$2\sqrt{34}/7$
(40)I	0	$3\sqrt{66}/11$	$1\sqrt{273}/7$	$2\sqrt{1430}/55$	$2\sqrt{1785}/35$
(40)L	0	0	$-2\sqrt{34}/7$	$2\sqrt{1785}/35$	$1\sqrt{9690}/35$

u^3	(31)P	(31)D	(31)F	(31)F'	(31)G	(31)H	(31)H'	(31)I	(31)K
(31)P	0	$-5\sqrt{2}/7$	$9\sqrt{70}/140$	$1\sqrt{22}/4$	$-3\sqrt{33}/14$	0	0	0	0
D	$5\sqrt{2}/7$	$9/14$	$-5\sqrt{42}/21$	0	$-1\sqrt{55}/7$	$1\sqrt{15015}/98$	$-2\sqrt{1155}/147$	0	0
F	$9\sqrt{70}/140$	$5\sqrt{42}/21$	$-7\sqrt{15}/60$	$\sqrt{231}/12$	$3\sqrt{14}/28$	$-1\sqrt{858}/21$	$-11\sqrt{66}/84$	$1\sqrt{39}/6$	0
F'	$1\sqrt{22}/4$	0	$\sqrt{231}/12$	$3\sqrt{15}/20$	$-7\sqrt{110}/44$	0	$1\sqrt{210}/12$	$\sqrt{15015}/110$	0
G	$3\sqrt{33}/14$	$-\sqrt{55}/7$	$-3\sqrt{14}/28$	$7\sqrt{110}/44$	$39\sqrt{11}/154$	$-\sqrt{7}/49$	$9\sqrt{91}/98$	$-\sqrt{10010}/154$	$-6\sqrt{462}/77$
H	0	$-\sqrt{15015}/98$	$-\sqrt{858}/21$	0	$1\sqrt{7}/49$	$-15\sqrt{429}/182$	$-2\sqrt{33}/21$	$-3\sqrt{15}/7$	$22\sqrt{26}/91$
H'	0	$2\sqrt{1155}/147$	$-11\sqrt{66}/84$	$\sqrt{210}/12$	$-9\sqrt{91}/98$	$-2\sqrt{33}/21$	$2\sqrt{429}/21$	$2\sqrt{195}/21$	$6\sqrt{2}/7$
I	0	0	$-1\sqrt{39}/6$	$-\sqrt{15015}/110$	$-\sqrt{10010}/154$	$3\sqrt{15}/7$	$-2\sqrt{195}/21$	$6\sqrt{1430}/385$	$\frac{10\sqrt{187}}{77}$
K	0	0	0	0	$6\sqrt{462}/77$	$22\sqrt{26}/91$	$6\sqrt{2}/7$	$\frac{-10\sqrt{187}}{77}$	$\frac{3\sqrt{442}}{91}$

TABLEAU II (suite)

IV. Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$

1°) Construction des systèmes linéaires

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe II la construction des opérateurs biélectroniques symétriques cherchés nécessite la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan de $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ intervenant dans les transformations linéaires :

$$|(\sigma_1\sigma_2)\sigma\, u\, k\rangle = \sum_{\substack{u'_1 x'_1 \\ u'_2 x'_2 \\ \alpha' k'_1 k'_2}} \langle \sigma_1 x'_1 u_1 + \sigma_2 x'_2 u_2 \alpha' | \sigma\, x\, u\rangle \langle u'_1 k'_1 + u'_2 k'_2 | \alpha' u\, x\, k\rangle$$

$$|\sigma_1 u'_1 x'_1 k'_1, \sigma_2 u'_2 x'_2 k'_2, \alpha' x\, k\rangle \qquad (14)$$

Les σ_i x_i u_i k_i sont les représentations de Sp_{10}, SU_2, SO_5, R_3 apparaissant dans la classification des opérateurs monoélectroniques W_i^{xk} et les σ sont les représentations apparaissant dans le développement du pléthysme

$$[\langle 2\rangle + \langle 1^2\rangle] \otimes \{2\}$$

soit

$$\langle 1^2\rangle \otimes \{2\} = \langle 0\rangle + \langle 1^2\rangle + \langle 2^2\rangle + \langle 1^4\rangle$$

$$\langle 2\rangle \otimes \{2\} = \langle 0\rangle + \langle 1^2\rangle + \langle 2^2\rangle + \langle 4\rangle$$

$$\langle 2\rangle\langle 1\rangle = \langle 1^2\rangle + \langle 2\rangle + \langle 21^2\rangle + \langle 31\rangle$$

L'indice α' repère les ensembles $(u_i u_j)$ si la représentation u apparait plusieurs fois dans le produit de Kronecker $u_i \times u_j$. Ce n'est pas le cas dans notre étude mais nous l'avons introduit pour plus de généralités car il serait indispensable si l'on voulait calculer l'ensemble des coefficients de Clebsch-Gordan nécessaires à l'application du théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs à deux corps que nous avons définis.

L'opérateur de Casimir du groupe Sp_{10} pourles configurations d^N s'exprime en fonction des générateurs du groupe par

$$G_{sp_{10}} = \frac{1}{8}\left[(W^{01}(dd))^2 + (W^{03}(dd))^2 + (W^{10}(dd))^2 + (W^{12}(dd))^2 + (W^{14}(dd))^2\right] \qquad (15)$$

A une représentation irréductible $\langle\sigma\rangle$ de Sp_{10} caractérisée par son poids le plus haut $(\sigma_1 \ldots\ldots \sigma_5)$ correspond une valeur propre de l'opérateur $G_{Sp_{10}}$ donnée par l'expression

$$G(\sigma) = \frac{1}{16}\left[\sigma_1(\sigma_1+10) + \sigma_2(\sigma_2+8) + \ldots\ldots + \sigma_5(\sigma_5+2)\right.$$

On a $W^{01}.W^{01} + W^{03}.W^{03} = \frac{1}{2}(V^1.V^1 + V^3.V^3) = \frac{3}{2} G_{SO_5}$

et $W^{10}.W^{10} = \frac{2}{5} S^2$

On peut écrire (15) sous la forme

$$8 G_{Sp_{10}} - \frac{3}{2} G_{SO_5} - \frac{2}{5} S^2 = W^{12}.W^{12} + W^{14}.W^{14}$$

Lorsqu'on sépare en deux espaces soit $W^{1k} = W_A^{1k} + W_B^{1k}$ on trouve l'expression

$$\boxed{8G_{Sp_{10}} - 8G^A_{Sp_{10}} - 8G^B_{Sp_{10}} - \frac{3}{2}G_{SO_5} + \frac{3}{2}G^A_{SO_5} + \frac{3}{2}G^B_{SO_5} - \frac{2}{5}S^2 + \frac{2}{5}S_A^2 + \frac{2}{5}S_B^2 = 2\sum_{k=2,4} W_A^{1K}.W_B^{1K}} \quad (16)$$

Suivant la méthode décrite dans le chapitre I nous appliquons l'expression (16) sur les deux membres de l'équation (14) et nous trouvons tout calcul fait que les coefficients des transformations linéaires cherchées sont définis par les équations :

$$F \times \langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 \alpha | \sigma x u\rangle \langle u_1 k_1 + u_2 k_2 | \alpha u z k\rangle - 2 \sum_{\psi_1' \psi_2' \alpha'} \langle \sigma_1 x_1' u_1' + \sigma_2 x_2' u_2' \alpha' | \sigma x u\rangle$$

$$\langle u_1' k_1' + u_2' k_2' | \alpha' u z k\rangle (-1)^{x_1'+k_1'+x_2+k_2+x+k} \begin{Bmatrix} x_1' & x_2' & x \\ x_2 & x_1 & 1 \end{Bmatrix} \sum_{K=2,4} \begin{Bmatrix} k_1' & k_2' & k \\ k_2 & k_1 & K \end{Bmatrix}$$

$$\langle \sigma_1 x_1 u_1 k_1 \| W^{1K} \| \sigma_1' x_1' u_1' k_1' \rangle \langle \sigma_2 x_2 u_2 k_2 \| W^{1K} \| \sigma_2 x_2' u_2' k_2' \rangle = 0$$

où $F = \left[8G(\sigma) - 8G(\sigma_1) - 8G(\sigma_2) - \frac{3}{2}G(u) + \frac{3}{2}G(u_1) + \frac{3}{2}G(u_2) - \frac{2}{5}S(S+1) + \frac{2}{5}S_1(S_1+1) + \frac{2}{5}S_2(S_2+1)\right]$

et $\psi_i' = x_i' u_i' k_i'$

Nous préférons écrire ces équations sous une autre forme. On multiplie les 2 membres par $\sum_{\alpha k_1 k_2} \langle u_1 k_1 + u_2 k_2 | \alpha u k\rangle$

et on obtient finalement les équations :

$$F\langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 \alpha | \sigma x u\rangle - 2 \sum_{\substack{x'_1 x'_2 \\ u'_1 u'_2 \alpha'}} \langle \sigma_1 x'_1 u'_1 + \sigma_2 x'_2 u'_2 \alpha' | \sigma x u\rangle$$

$$\sum_{\substack{k'_1 k'_2 \\ k_1 k_2}} \langle u'_1 k'_1 + u'_2 k'_2 | \alpha' u k\rangle \langle u_1 k_1 + u_2 k_2 | \alpha u k\rangle \begin{Bmatrix} x'_1 & x'_2 & x \\ x_2 & x_1 & 1 \end{Bmatrix} (-1)^{x'_1 + k'_1 + x_2 + k_2 + x + k} \qquad (17)$$

$$\sum_{K=2,4} \begin{Bmatrix} k'_1 & k'_2 & k \\ k_2 & k_1 & K \end{Bmatrix} \langle \sigma_1 x_1 u_1 k_1 \| W^{1K} \| \sigma_1 x'_1 u'_1 k'_1\rangle \langle \sigma_2 x_2 u_2 k_2 \| W^{1K} \| \sigma_2 x'_2 u'_2 k'_2\rangle = 0$$

où tous les coefficients $SO_5 \supset R_3 \langle u_i k_i + u_j k_j | uk\rangle$ nécessaires ont été calculés précédemment.

On pourrait calculer les éléments de matrices réduits des W_i^{1k} à l'aide des relations de commutation et du théorème de Wigner-Eckart, mais il est plus simple ici de les calculer pour les configurations $\langle 1^p\rangle$ qui apparaissent dans la classification des états d^N à l'aide de la formule :

$$\langle \sigma u x k \| W^{1k} \| \sigma' u' x' k'\rangle = N \sqrt{3} \left\{[x][x'][k][k'][K]\right\}^{1/2} \sum_{\bar{\Psi}} \langle \bar{\Psi} | \} \Psi\rangle \langle \bar{\Psi} | \} \Psi'\rangle$$
$$(-1)^{\bar{x} + \bar{k} + x + k + 3/2} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1 & 1/2 \\ x & \bar{x} & x' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & K & l \\ k & \bar{k} & k' \end{Bmatrix}$$

où $\bar{\Psi}$, Ψ représentent les états de d^{N-1} et d^N et $\langle \bar{\Psi} | \} \Psi\rangle$ les coefficients de parenté fractionnelle tabulés dans Nielson et Koster.

Pour la représentation $\langle 2\rangle$ on a utilisé la formule (18) donnant les éléments de matrice réduits des W^{1k} en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan.

On a $\langle 1\rangle\langle 1\rangle = \langle 0\rangle, \langle 1^2\rangle, \langle 2\rangle$ soit

$$\langle 1\rangle^2 (10)\ D \times \langle 1\rangle^2 (10)\ D \rightarrow \langle 2\rangle \begin{matrix} {}^1(11)\ P, F \\ {}^3(00)\ S \\ {}^3(20)\ D, G \end{matrix}$$

Les sommes se réduisent à un seul terme et les C.C.G. utilisés sont égaux à 1. On obtient donc simplement

$$(\langle 2\rangle x u k \| W^{1K} \| \langle 2\rangle x' u' k') = (\langle 1\rangle^2(10)D \| W^{1K} \| \langle 1\rangle^2(10)D) \left\{[x][x'][k][k']\right\}^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} x & 1 & x' \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k & K & k' \\ 2 & 2 & 2 \end{Bmatrix} (-1)^K \left[(-1)^{x'+k'} + (-1)^{x+k}\right]$$

avec $(\langle 1\rangle^2(10)D \| W^{12} \| \langle 1\rangle^2(10)D) = \sqrt{15}$

$(\langle 1\rangle^2(10)D \| W^{14} \| \langle 1\rangle^2(10)D) = 3\sqrt{3}$

Nous disposons maintenant des données nécessaires à la construction, par le programme CLEGA 1, des systèmes linéaires par valeurs de $(\sigma_1\sigma_2)\sigma x u k$ données. Les coefficients $(\sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 | \sigma x u)$ ne dépendent pas de k et nous obtiendrons les mêmes systèmes pour chaque valeur de k. En guise de vérifications des données (utiles mais non suffisantes) nous les avons tous fait construire par CLEGA 1.

2°) <u>Détermination des coefficients</u>

Dans les cas traités ici il n'apparait pas de dégénérescence et le seul problème est toujours la détermination des phases des coefficients et la vérification complète des CCG obtenus. Les éléments de matrice des W^{1k} sont donnés par la formule

$$\langle(\sigma_1\sigma_2)\sigma x u k \| W^{1K} \|(\sigma_1\sigma_2)\sigma' x' u' k'\rangle = \sum_{\substack{\psi_1\psi_2 \\ \psi_1'\psi_2'}} \langle\sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 | \sigma x u\rangle\langle\sigma_1 x_1' u_1' + \sigma_2 x_2' u_2' | \sigma' x' u'\rangle$$

$$\langle u_1 k_1 + u_2 k_2 | u x k\rangle\langle u_1' k_1' + u_2' k_2' | u' x' k'\rangle \Big[\delta(\psi_2\psi_2')(-1)^{k_1+k_2+k_1'+K+x_1+x_2+x_2'+1} \left\{[k][k'][x][x']\right\}^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} k & K & k' \\ k_1' & k_2 & k_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} x & 1 & x' \\ x_1' & x_2 & x_1 \end{Bmatrix} \langle\sigma_1 x_1 u_1 k_1 \| W^{1K} \| \sigma_1 x_1' u_1' k_1'\rangle + \delta(\psi_1\psi_1')(-1)^{k_1'+k_2'+k+K+x_1'+x_2'+x+1}$$

$$\left\{[k][k'][x][x']\right\}^{1/2} \begin{Bmatrix} k & K & k' \\ k_2' & k_1 & k_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} x & 1 & x' \\ x_2' & x_1 & x_2 \end{Bmatrix} \langle\sigma_2 x_2 u_2 k_2 \| W^{1K} \| \sigma_2 x_2' u_2' k_2'\rangle \Big] \quad (18)$$

avec $\psi_i \equiv (x_i u_i k_i)$

Pour les représentations $\langle\sigma\rangle$ de Sp_{10} contenant dans leur réduction à $SU_2 \times SO_5$ un nombre important de représentations comme par exemple $\langle 2^2 \rangle$ et $\langle 21^2 \rangle$ les formules (18) pour $K = 2,4$ sont très longues à calculer même pour un gros ordinateur. Il nous a paru cependant indispensable de vérifier complètement, en grandeur et en signe, les coefficients obtenus.

a) Cas de l'échange $\sigma_1 \sigma_2$, $\sigma_2 \sigma_1$ et des carrés Kronecker

L'étude de la formule donnant les systèmes (17) et de la formule (18) donne le résultat

$$\langle \sigma_2\, x_2 u_2 + \sigma_1\, x_1\, u_1 | \sigma\, x\, u \rangle = (-1)^{x_1+x_2+x} \langle \sigma_1\, x_1\, u_1 + \sigma_2\, x_2\, u_2 | \sigma x u \rangle$$

et comme précédemment on peut exprimer l'ensemble des résultats par la formule

$$\boxed{\langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 | \sigma x u \rangle = (-1)^{x_1+x_2+x+p_1+p_2} \langle \sigma_2 x_2 u_2 + \sigma_1 x_1 u_1 | \sigma x u \rangle} \qquad (19)$$

avec
- $p_1 = 0$ si $u_1 = u_2$ et u symétrique
- $p_1 = 1$ " " antisymétrique
- p_1 arbitraire $= 0$ si $u_1 \neq u_2$
- $p_2 = 0$ si $\sigma_1 = \sigma_2$ et σ_s
- $p_2 = 1$ si $\sigma_1 = \sigma_2$ et σ_a
- p_2 arbitraire $= 0$ si $\sigma_1 \neq \sigma_2$

Cette formule appliquée dans le cas $(\sigma \times \sigma)\sigma_s$ et $u_i \neq u_j$ pourrait faire croire que le pléthysme $\langle\sigma\rangle \otimes \{2\}$ ne donne pas que des opérateurs symétriques par rapport à l'échange (1, 2).

$$\langle \sigma\, x_1 u_1 + \sigma\, x_2 u_2 \mid \sigma_s\, x\, u \rangle = (-1)^{x_1+x_2+x} \langle \sigma\, x_2 u_2 + \sigma\, x_1 u_1 \mid \sigma_s\, x\, u \rangle$$

En fait, si nous écrivons explicitement le développement d'un opérateur biélectronique on obtient

$$[(\sigma_1 x \sigma_2)\sigma_u]^k_q = \sum \langle \sigma_1 x_1 u_1 + \sigma_2 x_2 u_2 \mid \sigma x u \rangle \langle u_1 k_1 + u_2 k_2 \mid u k \rangle \langle k_1 q_1 + k_2 q_2 \mid k q \rangle \langle x_1 \pi_1 + x_2 \pi_2 \mid x \pi \rangle [\sigma_1 u_1] W^{x_1 k_1}_{\pi_1 q_1} [\sigma_2 u_2] W^{x_2 k_2}_{\pi_2 u_2}$$

L'échange (1,2) donne $(-1)^{x_1+x_2+x+\rho_1+\rho_2} (-1)^{k_1+k_2+k+\rho_1} (-1)^{k_1+k_2+k} \quad (-1)^{x_1+x_2+x}$

soit au total $(-1)^{\rho_2}$

Ainsi dans le cas $(\sigma x \sigma)\sigma_s$, $\rho_2 = 0$ le pléthysme a bien sélectionné les opérateurs biélectroniques symétriques.

b) <u>Vérifications finales par le calcul des valeurs propres de l'opérateur d. Casimir de Sp_{10} et tableaux des résultats</u>

On peut écrire successivement

$$\langle \sigma S_u L M_S M_L \mid G \mid \sigma S_u L M_S M_L \rangle = G(\sigma) = (-1)^{S+L-M_S-M_L} \begin{pmatrix} S & 0 & S \\ -M_S & 0 & M_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 0 & L \\ -M_L & 0 & M_L \end{pmatrix} \langle \sigma S_u L \| G \| \sigma S_u L \rangle$$

$$\text{soit} \quad G(\sigma) = \frac{1}{\sqrt{[S][L]}} \langle \sigma S_u L \| G \| \sigma S_u L \rangle$$

$$\langle \sigma S_u L \| G \| \sigma S_u L \rangle = \langle \sigma S_u L \| \frac{1}{8} \sum (-1)^{x+k} \{ W^{xk} W^{xk} \}^{oo} \sqrt{[x][k]} \| \sigma S_u L \rangle$$

Soit après développement $G(\sigma) = \frac{1}{8[S][L]} \sum_{xk} \sum_{u''S''L''} (-1)^{S+L+S''+L''} \langle \sigma S_u L \| W^{xk} \| \sigma S'' u'' L'' \rangle \langle \sigma S'' u'' L'' \| W^{xk} \| \sigma S_u L \rangle$

D'autre part on a

$$\langle \gamma S L \| W^0 (dd) \| \gamma' S' L' \rangle = \sqrt{[S]} \frac{1}{2\sqrt{5}} \langle \gamma S L \| L \| \gamma' S' L' \rangle = \sqrt{[S]} \frac{1}{2\sqrt{5}} \sqrt{L(L+1)(2L+1)}\, \delta(\gamma\gamma')\delta(SS')\delta(LL')$$

$$\langle \gamma S L \| W^1 (dd) \| \gamma' S' L' \rangle = \sqrt{[L]} \sqrt{\frac{2}{5}}\, \delta(\gamma\gamma')\delta(LL')\delta(SS')$$

On obtient au total pour G (σ) l'expression suivante :

$$G(\sigma) = \frac{1}{8[S][L]} \left[\frac{[S]}{20} L(L+1)(2L+1) + \frac{2}{5}[L] S(S+1)(2S+1) \right.$$
$$+ \frac{4}{2}[S] \sum_{L''} (-1)^{L+L''} \langle \sigma u L \| U^3 \| \sigma u L'' \rangle \langle \sigma u L'' \| U^3 \| \sigma u L \rangle$$
$$+ \sum_{u''S''L''} (-1)^{S+S''+L+L''} \langle \sigma u S L \| W^{12} \| \sigma u'' S'' L'' \rangle \langle \sigma u'' S'' L'' \| W^{12} \| \sigma u S L \rangle$$
$$\left. + \sum_{u''S''L''} (-1)^{S+S''+L+L''} \langle \sigma u S L \| W^{14} \| \sigma u'' S'' L'' \rangle \langle \sigma u'' S'' L'' \| W^{14} \| \sigma u S L \rangle \right]$$

On peut vérifier sur un cas simple que la formule obtenue, appliquée sur les résultats donnés dans les tables (VIII), redonne bien les valeurs propres G (σ).

Pour les représentations $\langle 2^2 \rangle$ et $\langle 21^2 \rangle$ le très grand nombre d'éléments de matrice $\langle \|W^{12}\| \rangle$ et $\langle \|W^{14}\| \rangle$ oblige bien sûr à calculer la formule sur ordinateur.

L'ensemble des résultats du calcul des coefficients de Clebsch-Gordan $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ qui nous intéressent est donné dans les tables (VII) et toutes les vérifications ont été faites.

TABLEAU VII

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SP10>SU2*SO5

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE <11><11>

[<11><11>] <0>[0](00)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <0>[0](00)) = 1(330)/22
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <0>[0](00)) = 1(154)/22

[<11><11>] <1>[0](20)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <11>[0](20)) = -1(10)/4
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <11>[0](20)) = 1(6)/4

[<11><11>] <11>[1](11)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <11>[1](11)) = 1(15)/6
(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <11>[1](11)) = -1(42)/12
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <11>[1](11)) = -1(42)/12

[<11><11>] <1 >[0](22)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <1 >[0](22)) = -1(2)/2
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <1 >[0](22)) = -1(2)/2

[<11><11>] <1 >[1](21)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <1 >[1](21)) = 1(3)/3
(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <1 >[1](21)) = -1(3)/3
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <1 >[1](21)) = -1(3)/3

[<11><11>] <22>[0](00)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[0](00)) = -1(154)/22
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <22>[0](00)) = 1(330)/22

[<11><11>] <22>[0](10)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[0](10)) = 1(1)/1

(SUITE 1)

[<11><11>] <22>[0](20)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[0](20)) = 1(5)/4
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <22>[0](20)) = 1(10)/4

[<11><11>] <22>[0](22)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[0](22)) = -1(2)/2
(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <22>[0](22)) = 1(2)/2

[<11><11>] <22>[0](40)

(<11>[0](20) + <11>[0](20) / <22>[0](40)) = 1(1)/1

[<11><11>] <22>[1](11)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[1](11)) = 1(21)/5
(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <22>[1](11)) = 1(30)/12
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <22>[1](11)) = 1(30)/12

[<11><11>] <22>[1](20)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[1](20)) = 0
(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <22>[1](20)) = 1(2)/2
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <22>[1](20)) = 1(2)/2

[<11><11>] <22>[1](21)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[1](21)) = 1(5)/3
(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <22>[1](21)) = 1(5)/6
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <22>[1](21)) = 1(5)/6

[<11><11>] <22>[1](31)

(<11>[1](11) + <11>[0](20) / <22>[1](31)) = 1(2)/2
(<11>[0](20) + <11>[1](11) / <22>[1](31)) = 1(2)/2

[<11><11>] <1 >[2](10)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <1 >[2](10)) = 1(1)/1

[<11><11>] <22>[2](00)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[2](00)) = 1(1)/1

(SUITE 2)

[<11><11>] <22>[2](20)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[2](20)) = 1(1)/1

[<11><11>] <22>[2](22)

(<11>[1](11) + <11>[1](11) / <22>[2](22)) = 1(1)/1

TABLEAU VII

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SP10>SU2*SO5

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE <2 ><11>

[<2 ><11>] <11>[0](20)

(<2 >[0](11) + <11>[0](20) / <11>[0](20)) = 1(1)/2
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <11>[0](20)) = 1(3)/2

[<2 ><11>] <11>[1](11)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <11>[1](11)) = 1(15)/10
(<2 >[1](00) + <11>[1](11) / <11>[1](11)) = 1(2)/5
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <11>[1](11)) = -1(42)/10
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <11>[1](11)) = -1(35)/10

[<2 ><11>] <2 >[0](11)

(<2 >[0](11) + <11>[0](20) / <2 >[0](11)) = -1(14)/8
(<2 >[1](00) + <11>[1](11) / <2 >[0](11)) = -1(2)/4
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <2 >[0](11)) = 1(42)/8

[<2 ><11>] <2 >[1](00)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <2 >[1](00)) = -1(15)/6
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <2 >[1](00)) = 1(21)/6

[<2 ><11>] <2 >[1](20)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <2 >[1](20)) = 1(10)/8
(<2 >[1](00) + <11>[0](20) / <2 >[1](20)) = 1(6)/12
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <2 >[1](20)) = -5(3)/12
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <2 >[1](20)) = 3(2)/8

[<2 ><11>] <211>[0](11)

(<2 >[0](11) + <11>[0](20) / <211>[0](11)) = 1(30)/8
(<2 >[1](00) + <11>[1](11) / <211>[0](11)) = -1(210)/20
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[0](11)) = 1(10)/40

(SUITE 1)

[<2 ><11>] <211>[0](21)

(<2 >[0](11) + <11>[0](20) / <211>[0](21)) = -1(3)/2
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[0](21)) = 1(1)/2

[<2 ><11>] <211>[0](31)

(<2 >[0](11) + <11>[0](20) / <211>[0](31)) = 1(1)/2
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[0](31)) = 1(3)/2

[<2 ><11>] <211>[1](20)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <211>[1](20)) = 1(10)/8
(<2 >[1](00) + <11>[0](20) / <211>[1](20)) = -1(6)/4
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[1](20)) = 1(3)/4
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <211>[1](20)) = 3(2)/8

[<2 ><11>] <211>[1](22)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <211>[1](22)) = -1(1)/2
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <211>[1](22)) = 1(3)/2

[<2 ><11>] <211>[1](31)

(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[1](31)) = -1(2)/2
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <211>[1](31)) = 1(2)/2

[<2 ><11>] <211>[1](10)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <211>[1](10)) = 1(1)/1

[<2 ><11>] <211>[1](11)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <211>[1](11)) = 1(35)/10
(<2 >[1](00) + <11>[1](11) / <211>[1](11)) = -1(42)/10
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[1](11)) = -1(2)/5
(<2 >[1](20) + <11>[0](20) / <211>[1](11)) = 1(15)/10

(SUITE 2)

[<2 ><11>] <211>[1](21)

(<2 >[0](11) + <11>[1](11) / <211>[1](21)) = 1(2)/2
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[1](21)) = -1(2)/2

[<2 ><11>] <211>[2](11)

(<2 >[1](00) + <11>[1](11) / <211>[2](11)) = 1(30)/10
(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[2](11)) = 1(70)/10

[<2 ><11>] <211>[2](21)

(<2 >[1](20) + <11>[1](11) / <211>[2](21)) = 1(1)/1

TABLEAU VII

COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN SP10>SU2*SO5

CAS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU TYPE <2 ><2 >

[<2 ><2 >] <0>[0](00)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <0>[0](00)) = 1(22)/11
(<2 >[1](00) + <2 >[1](00) / <0>[0](00)) = 1(165)/55
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <0>[0](00)) = 1(2310)/55

[<2 ><2 >] <11>[0](20)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <11>[0](20)) = -1(2)/4
(<2 >[1](00) + <2 >[1](20) / <11>[0](20)) = 1(10)/10
(<2 >[1](20) + <2 >[1](00) / <11>[0](20)) = 1(10)/10
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <11>[0](20)) = 3(30)/20

[<2 ><2 >] <11>[1](11)

(<2 >[0](11) + <2 >[1](00) / <11>[1](11)) = -1(30)/30
(<2 >[0](11) + <2 >[1](20) / <11>[1](11)) = 1(70)/20
(<2 >[1](00) + <2 >[0](11) / <11>[1](11)) = -1(30)/30
(<2 >[1](20) + <2 >[0](11) / <11>[1](11)) = 1(70)/20
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <11>[1](11)) = 1(21)/5

[<2 ><2 >] <22>[0](00)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <22>[0](00)) = 1(154)/22
(<2 >[1](00) + <2 >[1](00) / <22>[0](00)) =-4(1155)/165
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[0](00)) = -1(330)/330

[<2 ><2 >] <22>[0](10)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <22>[0](10)) = 1(1)/1

[<2 ><2 >] <22>[0](20)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <22>[0](20)) = -1(5)/4
(<2 >[1](00) + <2 >[1](20) / <22>[0](20)) = -1(30)/10
(<2 >[1](20) + <2 >[1](00) / <22>[0](20)) = -1(30)/10
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[0](20)) = 1(10)/20

(SUITE 1)

[<2 ><2 >] <22>[0](22)

(<2 >[0](11) + <2 >[0](11) / <22>[0](22)) = 1(2)/2
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[0](22)) = 1(2)/2

[<2 ><2 >] <22>[0](40)

(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[0](40)) = -1(1)/1

[<2 ><2 >] <22>[1](11)

(<2 >[0](11) + <2 >[1](00) / <22>[1](11)) = -1(210)/30
(<2 >[0](11) + <2 >[1](20) / <22>[1](11)) = -3(10)/20
(<2 >[1](00) + <2 >[0](11) / <22>[1](11)) = -1(210)/30
(<2 >[1](20) + <2 >[0](11) / <22>[1](11)) = -3(10)/20
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[1](11)) = 1(3)/6

[<2 ><2 >] <22>[1](20)

(<2 >[0](11) + <2 >[1](20) / <22>[1](20)) = 1(6)/6
(<2 >[1](00) + <2 >[1](20) / <22>[1](20)) = -1(3)/3
(<2 >[1](20) + <2 >[0](11) / <22>[1](20)) = 1(6)/6
(<2 >[1](20) + <2 >[1](00) / <22>[1](20)) = 1(3)/3
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[1](20)) = 0

[<2 ><2 >] <22>[1](21)

(<2 >[0](11) + <2 >[1](20) / <22>[1](21)) = -1(2)/2
(<2 >[1](20) + <2 >[0](11) / <22>[1](21)) = -1(2)/2

[<2 ><2 >] <22>[1](31)

(<2 >[0](11) + <2 >[1](20) / <22>[1](31)) = 1(6)/6
(<2 >[1](20) + <2 >[0](11) / <22>[1](31)) = 1(6)/6
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[1](31)) = -1(6)/3

[<2 ><2 >] <22>[2](00)

(<2 >[1](00) + <2 >[1](00) / <22>[2](00)) = -2(30)/15
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[2](00)) = 1(105)/15

(SUITE 2)

[<2 ><2 >] <22>[2](20)

(<2 >[1](00) + <2 >[1](20) / <22>[2](22)) = 1(5)/5
(<2 >[1](20) + <2 >[1](00) / <22>[2](20)) = 1(5)/5
(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[2](20)) = -1(15)/5

[<2 ><2 >] <22>[2](22)

(<2 >[1](20) + <2 >[1](20) / <22>[2](22)) = 1(1)/1

$\langle 5 \rangle = \langle 1^2 \rangle$ $\qquad$ $(\langle 1^2 \rangle u\,[s]\,L \,\|\, W^{1K} \,\|\, \langle 1^2 \rangle u'\,[s']\,L')$

W^{12}	$\langle 1^2 \rangle {}^1(20)D$	$\langle 1^2 \rangle {}^1(20)G$	$\langle 1^2 \rangle {}^3(11)P$	$\langle 1^2 \rangle {}^3(11)F$
$^1(20)D$	0	0	$-3\sqrt{2}/2$	$4\sqrt{42}/7$
$^1(20)G$	0	0	0	$-3\sqrt{105}/7$
$^3(11)P$	$-3\sqrt{2}/2$	0	$-3\sqrt{35}/5$	$6\sqrt{10}/5$
$^3(11)F$	$4\sqrt{42}/7$	$-3\sqrt{105}/7$	$6\sqrt{10}/5$	$3\sqrt{10}/5$

W^{14}	$\langle 1^2 \rangle {}^1(20)D$	$\langle 1^2 \rangle {}^1(20)G$	$\langle 1^2 \rangle {}^3(11)P$	$\langle 1^2 \rangle {}^3(11)F$
$^1(20)D$	0	0	0	$-3\sqrt{105}/7$
$^1(20)G$	0	0	$-3\sqrt{3}$	$-3\sqrt{462}/14$
$^3(11)P$	0	$-3\sqrt{3}$	0	$-3\sqrt{30}/5$
$^3(11)F$	$-3\sqrt{105}/7$	$-3\sqrt{462}/14$	$-3\sqrt{30}/5$	$-3\sqrt{165}/5$

TABLEAU VIII

$\langle 3 \rangle \equiv \langle 2 \rangle$ $\qquad$ $(\langle 2 \rangle\ u\ [s]\ L \parallel W^{1K} \parallel \langle 2 \rangle\ u'\ [s']\ L')$

W^{12}	$\langle 2 \rangle^1(11)P$	$\langle 2 \rangle^1(11)F$	$\langle 2 \rangle^3(00)S$	$\langle 2 \rangle^3(20)D$	$\langle 2 \rangle^3(20)G$
$^1(11)P$	0	0	0	$3\sqrt{2}/2$	0
$^1(11)F$	0	0	0	$-4\sqrt{42}/7$	$3\sqrt{105}/7$
$^3(00)S$	0	0	0	$2\sqrt{3}$	0
$^3(20)D$	$3\sqrt{2}/2$	$-4\sqrt{42}/7$	$2\sqrt{3}$	$-3\sqrt{15}/7$	$12\sqrt{3}/7$
$^3(20)G$	0	$3\sqrt{105}/7$	0	$12\sqrt{3}/7$	$3\sqrt{330}/7$

W^{14}	$\langle 2 \rangle^1(11)P$	$\langle 2 \rangle^1(11)F$	$\langle 2 \rangle^3(00)S$	$\langle 2 \rangle^3(20)D$	$\langle 2 \rangle^3(20)G$
$^1(11)P$	0	0	0	0	$+3\sqrt{3}$
$^1(11)F$	0	0	0	$+3\sqrt{105}/7$	$+3\sqrt{462}/14$
$^3(00)S$	0	0	0	0	$6\sqrt{15}/5$
$^3(20)D$	0	$+3\sqrt{105}/7$	0	$12\sqrt{3}/7$	$3\sqrt{330}/7$
$^3(20)G$	$+3\sqrt{3}$	$+3\sqrt{462}/14$	$6\sqrt{15}/5$	$3\sqrt{330}/7$	$3\sqrt{2145}/35$

TABLEAU VIII (suite 1)

$\langle\sigma\rangle = \langle 1^4\rangle$ $\qquad$ $(\langle 1^4\rangle\, u\,[s]\, L \,\|\, W^{12} \,\|\, \langle 1^4\rangle\, u'\,[s']\, L')$

	$^1(22)S$	$^1(22)D$	$^1(22)F$	$^1(22)G$	$^1(22)I$	$^3(21)P$	$^3(21)D$	$^3(21)F$	$^3(21)G$	$^3(21)H$	$^5(10)D$
$^1(22)S$						0	$4\sqrt{21}/7$	0	0	0	0
$^1(22)D$						$-15\sqrt{14}/14$	$1\sqrt{15}/7$	0	$12\sqrt{5}/7$	0	0
$^1(22)F$						$+6\sqrt{14}/7$	$-1\sqrt{210}/7$	-3	$12\sqrt{35}/35$	$-6\sqrt{385}/35$	0
$^1(22)G$						0	$-3\sqrt{66}/7$	0	$27/7$	$6\sqrt{21}/7$	0
$^1(22)I$						0	0	0	$+6\sqrt{910}/35$	$-1\sqrt{390}/10$	0
$^3(21)P$	0	$-15\sqrt{14}/14$	$-6\sqrt{14}/7$	0	0	$6\sqrt{35}/35$	$-3\sqrt{14}/14$	$12\sqrt{35}/35$	0	0	$-3\sqrt{10}/2$
$^3(21)D$	$-4\sqrt{21}/7$	$-1\sqrt{15}/7$	$-1\sqrt{210}/7$	$+3\sqrt{66}/7$	0	$+3\sqrt{14}/14$	$-3\sqrt{15}/14$	$9\sqrt{21}/7$	$3\sqrt{5}/7$	0	$15\sqrt{21}/14$
$^3(21)F$	0	0	$+3$	0	0	$12\sqrt{35}/35$	$-9\sqrt{21}/7$	$-3\sqrt{10}/5$	$-6\sqrt{14}/7$	$3\sqrt{154}/7$	$+\sqrt{15}$
$^3(21)G$	0	$-12\sqrt{5}/7$	$+12\sqrt{35}/35$	$-27/7$	$-6\sqrt{910}/35$	0	$3\sqrt{5}/7$	$+6\sqrt{14}/7$	$3\sqrt{330}/35$	$3\sqrt{770}/35$	illegible
$^3(21)H$	0	0	$+6\sqrt{385}/35$	$+6\sqrt{21}/7$	$-1\sqrt{390}/10$	0	0	$3\sqrt{154}/7$	illegible	$-3\sqrt{5005}/35$	0
$^5(10)D$	0	0	0	0	0	$-3\sqrt{10}/2$	$-15\sqrt{21}/14$	$\sqrt{15}$	illegible	0	$-5\sqrt{3}/2$

TABLEAU VIII (suite 2)

$\langle T \rangle = \langle 1^4 \rangle$ $\quad (\langle 1^4 \rangle \; u\,[s]\, L \,\|\, W^{14} \,\|\, \langle 1^4 \rangle \; u'\,[s']\, L')$

	$^1(22)S$	$^1(22)D$	$^1(22)F$	$^1(22)G$	$^1(22)I$	$^3(21)P$	$^3(21)D$	$^3(21)F$	$^3(21)G$	$^3(21)H$	$^5(10)D$
$^1(22)S$						0	0	0	$6\sqrt{7}/7$	0	0
$^1(22)D$						0	$+10\sqrt{3}/7$	$-1\sqrt{210}/4$	$-3\sqrt{22}/28$	$1\sqrt{462}/7$	0
$^1(22)F$			○			$+9\sqrt{42}/28$	$+11\sqrt{21}/14$	$-1\sqrt{66}/4$	$9\sqrt{154}/28$	$-1\sqrt{6006}/28$	0
$^1(22)G$						$-3\sqrt{462}/28$	$+9\sqrt{15}/14$	$-3\sqrt{42}/4$	$-27\sqrt{26}/28$	$-3\sqrt{546}/28$	0
$^1(22)I$						0	$+1\sqrt{546}/7$	$+1\sqrt{546}/4$	$-3\sqrt{182}/28$	$+1\sqrt{78}$	0
$^3(21)P$	0	0	$-9\sqrt{42}/28$	$-3\sqrt{462}/28$	0	0	0	$-33\sqrt{105}/70$	$27\sqrt{35}/70$	$-3\sqrt{2310}/35$	0
$^3(21)D$	0	$-10\sqrt{3}/7$	$11\sqrt{21}/14$	$-9\sqrt{15}/14$	$-1\sqrt{546}/7$	0	$19\sqrt{3}/14$	$1\sqrt{210}/7$	$9\sqrt{22}/7$	$1\sqrt{462}/14$	$-5\sqrt{105}/14$
$^3(21)F$	0	$-1\sqrt{210}/4$	$+1\sqrt{66}/4$	$-3\sqrt{42}/4$	$1\sqrt{546}/4$	$-33\sqrt{105}/70$	$-1\sqrt{210}/7$	$-1\sqrt{165}/10$	$9\sqrt{385}/70$	$-1\sqrt{15015}/70$	$+5\sqrt{6}/2$
$^3(21)G$	$-6\sqrt{7}/7$	$+3\sqrt{22}/28$	$+9\sqrt{154}/28$	$+27\sqrt{26}/28$	$+3\sqrt{182}/28$	$-27\sqrt{35}/70$	$9\sqrt{22}/7$	$-9\sqrt{385}/70$	$3\sqrt{2145}/70$	$9\sqrt{5005}/70$	$+3\sqrt{770}/14$
$^3(21)H$	0	$+1\sqrt{462}/7$	$+1\sqrt{6006}/28$	$-3\sqrt{546}/28$	$1\sqrt{78}/1$	$-3\sqrt{2310}/35$	$-1\sqrt{462}/14$	$-1\sqrt{15015}/70$	$-9\sqrt{5005}/70$	$1\sqrt{15015}/35$	$-1\sqrt{330}/2$
$^5(10)D$	0	0	0	0	0	0	$+5\sqrt{105}/14$	$5\sqrt{6}/2$	$-3\sqrt{770}/14$	$-1\sqrt{330}/2$	$-3\sqrt{15}/2$

TABLEAU VIII (suite 3)

TABLE [<22>(J)[S]αL ‖W^12‖<22>(J')[S']α'L']

<22> (J)[S]L	<22> (J')[S']L'	
(00)1S	(20)3D	-1(385)/7
(10)1D	(21)3P	-3(1)/1
	(21)3D	-3(210)/14
	(21)3F	1(5)/1
	(21)3G	3(70)/7
(20)1D	(11)3P	5(42)/14
	(11)3F	-12(2)/7
	(20)3D	5(2)/7
	(20)3G	-4(10)/7
	(31)3P	-4(14)/7
	(31)3F	2(14)/7
	(31)3F'	2(110)/7
(20)1G	(11)3F	9(5)/7
	(20)3D	-4(10)/7
	(20)3G	-10(11)/7
	(31)3D	-2(10)/3
	(31)3F	2(35)/7
	(31)3F'	2(11)/21
	(31)3G	2(2)/1
	(31)3H	-2(286)/21
	(31)3H'	4(22)/7
	(31)3I	2(26)/3
(22)1S	(20)3D	3(105)/35

<22> (J)[S]L	<22> (J')[S']L'	
	(21)3D	-2(42)/7
	(31)3D	4(105)/35
(22)1D	(20)3D	-5(3)/7
	(20)3G	2(15)/7
	(21)3P	15(7)/14
	(21)3D	-1(30)/14
	(21)3G	-5(10)/7
	(31)3P	1(21)/14
	(31)3D	1(3)/1
	(31)3F	[illegible](21)/7
(22)1F	(20)3G	-1(105)/5
	(21)3P	[illegible](7)/7
	(21)3D	[illegible](105)/7
	(21)3F	[illegible]/2
	(21)3G	[illegible]/35
	(21)3H	[illegible]/5
	(31)3P	[illegible]/7
	(31)3D	[illegible]/14
	(31)3F	[illegible]/1
	(31)3G	[illegible]/70
	(31)3H	[illegible]/7
	(31)3H'	[illegible]/5
(22)1G	(20)3D	[illegible]

(22)1G	(20)3G	1(3)/7
	(21)3D	3(33)/7
	(21)3G	-27(2)/14
	(21)3H	-3(42)/7
	(31)3D	1(330)/30
	(31)3F	1(1155)/14
	(31)3F'	-7(3)/5
	(31)3G	-2(55)/11
	(31)3H	13(78)/42
	(31)3H'	9(5)/7
	(31)3I	-2(385)/33
(22)1I	(20)3G	-1(2730)/35
	(21)3G	-5(455)/33
	(21)3H	1(195)/10
	(31)3G	6(15015)/385
	(31)3H	1/(105)/35
	(31)3H'	1(1365)/70
	(31)3I	3(30030)/154
	(31)3K	-4(105)/7
(40)1D	(20)3D	-4(22)/7
	(20)3G	-1(110)/7
	(31)3P	-1(154)/7
	(31)3D	-9(22)/14
	(31)3F	1(154)/14
	(31)3F'	-1(10)/2
	(31)3G	9(5)/7
(40)1G	(20)3D	2(143)/7
	(20)3G	-4(130)/35
	(31)3D	-2(143)/21
	(31)3F	-1(2002)/14
	(31)3F'	1(130)/30
	(31)3G	2(715)/35
	(31)3H	-225(5)/105
	(31)3H'	-4(55)/35
	(31)3I	-4(55)/15
(40)1H	(20)3G	1(330)/5
	(31)3F	1(22)/2
	(31)3F'	3(70)/10
	(31)3G	-3(15)/5
	(31)3H	-9(770)/70
	(31)3H'	1(10010)/35
	(31)3I	4(195)/35
	(31)3K	-4(30)/7
(40)1I	(20)3G	1(546)/7
	(31)3H	6(21)/7
	(31)3H'	1(273)/7
	(31)3I	-1(5005)/14
	(31)3K	-4(21)/7
(40)1L	(31)3I	4(51)/7
	(31)3K	9(34)/7

TABLE [<22>(J)[S]αL $\|W^{AL}\|$ <22>(J')[S']α'L'] (SUITE 2)

(11)3P	(11)3P	9(35)/35		(31)3H'	6(77)/49
	(11)3F	-15(10)/35		(20)5D	-8(15)/7
	(20)3D	9(35)/35		(20)5G	15(6)/7
	(21)3P	6(35)/35	(20)3D	(20)3D	-3(15)/14
	(21)3D	-5(14)/7		(20)3G	5(3)/7
	(21)3F	12(35)/35		(31)3P	-6(105)/35
	(31)3P	-6(105)/35		(31)3F	3(105)/35
	(31)3D	12(35)/35		(31)3F'	3(33)/7
	(31)3F	-9(70)/35		(00)5S	-5(2)/2
	(31)3F'	6(22)/7		(20)5D	5(15)/14
	(20)5D	3(35)/7		(20)5G	-10(3)/7
(11)3F	(11)3F	-9(10)/35		(22)5S	3(42)/14
	(20)3D	-24(15)/35		(22)5D	-3(30)/7
	(20)3G	9(5)/7		(22)5G	4(33)/7
	(21)3P	33(10)/35	(20)3G	(20)3G	5(330)/14
	(21)3D	5(5)/7		(31)3D	-1(3)/1
	(21)3F	5(55)/5		(31)3F	3(42)/14
	(21)3G	-27(1)/7		(31)3F'	[illegible]
	(21)3H	5(11)/7		(31)3G	[illegible]
	(31)3P	-3(30)/35		(31)3H	-1(21[illegible]
	(31)3D	15(15)/35		(31)3H'	6(155)/35
	(31)3F	3(70)/15		(31)3I	1(195)/5
	(31)3F'	3(22)/14		(20)5D	-10(3)/7
	(31)3G	3(33)/7		(20)5G	-5(330)[illegible]
	(31)3H	5(1001)/49		(22)5D	5(6)/7

TABLE [<22>(U)[S]αL ‖ W^{12} ‖ <22>(U')[S']α'L'] (SUITE 3)

(20)3G	(22)5F	1(42)/2		(31)3P	-6(105)/35
	(22)5G	1(30)/14		(31)3D	-3(210)/28
	(22)5I	-1(275)/7		(31)3F	-27(5)/40
(21)3P	(21)3P	9(55)/28		(31)3F'	-3(77)/8
	(21)3D	-9(14)/28		(31)3G	9(462)/56
	(31)3P	33(105)/140		(31)3H	-3(286)/28
	(31)3D	-3(35)/14		(31)3H'	9(22)/14
	(31)3F	-9(70)/70		(22)5F	-3(5)/2
	(31)3F'	3(22)/14	(21)3G	(21)3G	3(330)/280
	(22)5D	15(70)/28		(21)3H	-5(770)/35
	(22)5F	3(70)/7		(31)3D	45(2)/28
(21)3D	(21)3D	3(15)/14		(31)3F	-27(7)/56
	(21)3F	-3(21)/14		(31)3F'	27(55)/56
	(21)3G	15(5)/14		(31)3G	297(10)/280
	(31)3P	9(42)/28		(31)3H	9(1430)/140
	(31)3D	15(5)/14		(31)3H'	-27(110)/70
	(31)3F	3(42)/28		(22)5D	30(1)/7
	(31)3F'	-3(330)/28		(22)5F	-5(7)/7
	(31)3G	3(165)/14		(22)5G	27(5)/14
	(22)5S	2(105)/7		(22)5I	3(182)/7
	(22)5D	5(3)/14	(21)3H	(21)3H	9(5005)/140
	(22)5F	5(42)/14		(31)3F	3(77)/7
	(22)5G	-3(330)/14		(31)3F'	3(5)/7
(21)3F	(21)3F	9(10)/8		(31)3G	3(210)/35
	(21)3G	15(14)/55		(31)3H	-3(55)/10

(21)3H	(31)3H'	-5(715)/20		(31)3H	-5(143)/28
	(31)3I	5(2730)/28		(31)3H'	1(11)/14
	(31)3K	5(105)/7		(20)5D	-1(105)/7
	(22)5F	-5(77)/7		(20)5G	-5(42)/14
	(22)5G	-5(105)/7		(22)5D	2(210)/7
	(22)5I	1(78)/4		(22)5F	-1(10)/1
(31)3P	(31)3P	5(35)/28		(22)5G	-5(462)/28
	(31)3D	1(105)/70	(31)3F'	(31)3F'	-93(10)/112
	(31)3F	-5(210)/14		(31)3G	-31(15)/280
	(31)3F'	1(66)/14		(31)3H	123(455)/980
	(20)5D	2(105)/7		(31)3H'	233(35)/490
	(22)5D	-1(210)/28		(20)5D	-5(33)/7
	(22)5F	1(210)/7		(20)5G	-1(330)/42
(31)3D	(31)3D	5(15)/7		(22)5G	7(30)/12
	(31)3F	1(105)/140	(31)3G	(31)3G	937(330)/3080
	(31)3F'	-9(33)/28		(31)3H	-1(390)/28
	(31)3G	5(66)/28		(31)3H'	57(30)/70
	(20)5G	-5(3)/5		(31)3I	2(4290)/55
	(22)5G	2(42)/7		(20)5G	1(15)/1
	(22)5D	1(30)/2		(22)5F	3(231)/14
	(22)5F	5(105)/14		(22)5G	-2(165)/11
	(22)5G	1(33)/5		(22)5I	3(6006)/77
(31)3F	(31)3F	-11(10)/15	(31)3H	(31)3H	72(5005)/3185
	(31)3F'	1(154)/15		(31)3H'	-11(385)/490
	(31)3G	9(231)/55		(31)3I	9(30)/70

(31)3H	(31)3K	-2(195)/91
	(20)5G	1(2145)/21
	(22)5F	3(143)/14
	(22)5G	-15(195)/42
	(22)5I	-17(42)/14
(31)3H'	(31)3H'	1(5005)/98
	(31)3I	17(390)/140
	(31)3K	9(15)/7
	(20)5G	-2(165)/7
	(22)5F	-2(11)/7
	(22)5G	-8(15)/7
	(22)5I	-1(545)/28
(31)3I	(31)3I	3(2145)/154
	(31)3K	-2(30)/7
	(20)5G	1(195)/3
	(22)5G	-2(2145)/33
	(22)5I	15(3003)/154
(31)3K	(31)3K	5(1105)/91
	(22)5I	15(42)/7
(00)5S	(20)5D	3(10)/2
(20)5D	(20)5D	-5(3)/14
	(20)5G	2(15)/7
	(22)5S	3(210)/14
	(22)5D	-15(6)/7
	(22)5G	4(165)/7
(20)5G	(20)5G	5(55)/14
	(22)5D	5(30)/7
	(22)5F	1(210)/2
	(22)5G	5(5)/14
	(22)5I	-1(1365)/7
(22)5S	(22)5D	2(105)/7
(22)5D	(22)5D	-15(3)/14
	(22)5F	5(42)/7
	(22)5G	1(330)/7
(22)5F	(22)5F	15(2)/4
	(22)5G	-1(2310)/28
(22)5G	(22)5G	-125(66)/308
	(22)5I	-4(15015)/77
(22)5I	(22)5I	5(429)/22

TABLE [<22>(U)[S]α L ‖ W^{14} ‖ <22>(U')[S']α'L']

<22> (U)[S]L	<22> (U')[S']L'	
(00)1S	(20)3G	-3(77)/7
(10)1D	(21)3D	5(42)/14
	(21)3F	1(15)/1
	(21)3G	-3(77)/7
	(21)3H	-1(33)/1
(20)1D	(11)3F	9(5)/7
	(20)3D	-4(10)/7
	(20)3G	-10(11)/7
	(31)3D	2(10)/3
	(31)3F	2(35)/7
	(31)3F'	2(11)/21
	(31)3G	-2(2)/1
	(31)3H	-2(286)/21
	(31)3H'	4(22)/7
	(31)3I	-2(25)/3
(20)1G	(11)3P	9(7)/7
	(11)3F	9(22)/14
	(20)3D	-10(11)/7
	(20)3G	-1(286)/7
	(31)3P	4(21)/21
	(31)3F	-4(154)/21
	(31)3F'	4(10)/7
	(31)3H	8(11)/7
	(31)3H'	4(143)/21
	(31)3K	4(15)/3
(22)1S	(20)3G	-1(21)/7
	(21)3G	-3(14)/7
	(31)3G	-1(462)/7
(22)1D	(20)3D	2(15)/7
	(20)3G	-1(66)/7
	(21)3D	-5(6)/7
	(21)3F	1(105)/4
	(21)3G	3(11)/28
	(21)3H	-1(231)/7
	(31)3D	-1(15)/3
	(31)3F	-9(210)/56
	(31)3F'	-7(55)/24
	(31)3G	-7(3)/4
	(31)3H	1(429)/21
	(31)3H'	5(33)/7
	(31)3I	1(39)/3
(22)1F	(20)3D	1(105)/5
	(21)3P	-9(21)/28
	(21)3D	-11(42)/28
	(21)3F	1(33)/4
	(21)3G	-9(77)/28

(22)1F	(21)3H	1(3003)/28
	(31)3P	-33(7)/28
	(31)3D	-19(105)/210
	(31)3F	1(55)/8
	(31)3F'	-7(210)/24
	(31)3G	-9(21)/28
	(31)3H	1(33)/42
	(31)3H'	-3(429)/28
	(31)3I	-1(390)/12
	(31)3K	3(2)/1
(22)1G	(20)3D	1(3)/7
	(20)3G	-2(78)/7
	(21)3P	3(231)/28
	(21)3D	-9(30)/28
	(21)3F	3(21)/4
	(21)3G	27(13)/28
	(21)3H	3(273)/28
	(31)3P	-5(77)/28
	(31)3D	3(3)/2
	(31)3F	-25(42)/153
	(31)3F'	7(330)/88
	(31)3G	-3(429)/44
	(31)3H	-31(3)/14
	(31)3H'	53(39)/84
	(31)3I	-3(4290)/44
	(31)3K	2(55)/11
(22)1I	(20)3D	-1(2730)/35
	(20)3G	1(546)/7
	(21)3D	-1(273)/7
	(21)3F	-1(273)/4
	(21)3G	3(91)/28
	(21)3H	-1(39)/1
	(31)3D	-4(2730)/105
	(31)3F	-1(546)/8
	(31)3F'	-7(4290)/264
	(31)3G	-17(3003)/308
	(31)3H	-4(21)/21
	(31)3H'	-1(273)/7
	(31)3I	2(255255)/231
	(31)3K	-5(2618)/77
(40)1D	(20)3D	-1(110)/7
	(20)3G	4(1)/7
	(31)3D	-31(110)/84
	(31)3F	1(385)/14
	(31)3F'	-1(1)/6
	(31)3G	-25(22)/77
	(31)3H	-67(25)/84
	(31)3H'	2(2)/7
	(31)3I	7(286)/66
(40)1G	(20)3D	-4(130)/35

(40)1G	(20)3G	5(5)/7
	(31)3P	-1(30030)/105
	(31)3D	-9(130)/70
	(31)3F	22(456)/105
	(31)3F'	2(143)/11
	(31)3G	-35(110)/77
	(31)3H	17(130)/182
	(31)3H'	20(10)/21
	(31)3I	-9(11)/11
	(31)3K	-8(858)/429
(40)1H	(20)3D	-1(330)/5
	(31)3P	-3(55)/5
	(31)3D	-1(330)/55
	(31)3F	1(2145)/10
	(31)3F'	-1(273)/6
	(31)3H	-1(2310)/12
	(31)3I	11(39)/21
	(31)3K	5(17)/7
(40)1I	(20)3D	1(546)/7
	(20)3G	2(2730)/35
	(31)3D	-1(546)/6
	(31)3F'	7(858)/33
	(31)3G	-1(15015)/55
	(31)3H	23(105)/105
	(31)3H'	+(1365)/35
	(31)3I	2(51051)/231
	(31)3K	3(13090)/77
(40)1L	(20)3G	2(255)/5
	(31)3G	4(5610)/55
	(31)3H	-5(23205)/455
	(31)3H'	5(1785)/35
	(31)3I	3(21318)/77
	(31)3K	3(20995)/91
(11)3P	(11)3F	9(30)/35
	(20)3G	9(210)/35
	(21)3F	3(105)/7
	(21)3G	-9(35)/35
	(21)3H	-3(2310)/35
	(31)3F	-1(210)/14
	(31)3F'	-3(55)/14
	(31)3G	-3(1155)/35
	(31)3H'	1(330)/5
	(20)5G	3(210)/7
(11)3F	(11)3F	3(165)/35
	(20)3D	9(6)/7
	(20)3G	9(165)/35
	(21)3P	3(30)/7
	(21)3D	6(15)/7
	(21)3G	18(110)/35
	(21)3H	-(330)/3

(11)3F	(31)3P	3(10)/7
	(31)3D	2(5)/7
	(31)3F'	3(3)/7
	(31)3G	5(30)/35
	(31)3H	-2(2310)/49
	(31)3H'	3(30030)/245
	(31)3I	-2(273)/7
	(31)3K	6(35)/7
	(20)5D	15(5)/7
	(20)5G	3(165)/7
(20)3D	(20)3D	6(3)/7
	(20)3G	3(330)/14
	(31)3D	1(3)/1
	(31)3F	3(42)/14
	(31)3F'	1(330)/70
	(31)3G	-3(15)/5
	(31)3H	-1(2145)/35
	(31)3H'	6(165)/35
	(31)3I	-1(195)/5
	(20)5D	-10(3)/7
	(20)5G	-5(330)/14
	(22)5D	5(6)/7
	(22)5F	-1(42)/2
	(22)5G	1(30)/14
	(22)5I	-1(273)/7
(20)3G	(20)3G	3(2145)/70
	(31)3P	3(70)/35
	(31)3F	-2(1155)/35
	(31)3F'	6(3)/7
	(31)3H	6(330)/35
	(31)3H'	1(4290)/35
	(31)3K	3(2)/1
	(00)5S	-3(10)/2
	(20)5D	-5(330)/14
	(20)5G	-1(2145)/14
	(22)5S	-1(210)/14
	(22)5D	-1(165)/7
	(22)5G	-2(195)/7
	(22)5I	1(1365)/7
(21)3P	(21)3F	9(105)/40
	(21)3G	99(35)/280
	(21)3H	9(2310)/140
	(31)3F	17(210)/112
	(31)3F'	51(56)/112
	(31)3G	3(1155)/56
	(31)3H'	1(330)/4
	(22)5F	9(210)/56
	(22)5G	3(2310)/56
(21)3D	(21)3D	-13(3)/7
	(21)3F	-13(210)/56

(21)3D	(21)3G	-9(22)/55
	(21)3H	-1(462)/7
	(31)3D	-5(50)/14
	(31)3F	-15(105)/55
	(31)3F'	19(33)/55
	(31)3G	81(5)/55
	(31)3H	-1(858)/14
	(31)3H'	3(55)/7
	(31)3I	-1(75)/2
	(22)5D	5(15)/7
	(22)5F	-11(105)/28
	(22)5G	+5(3)/28
	(22)5I	1(2730)/14
(21)3F	(21)3F	11(165)/45
	(21)3G	-27(385)/280
	(21)3H	-1(15015)/40
	(31)3P	-15(35)/55
	(31)3D	-15(21)/28
	(31)3F	-3(330)/15
	(31)3F'	3(42)/15
	(31)3G	3(165)/55
	(31)3H	9(165)/28
	(31)3H'	3(2145)/55
	(31)3I	3(78)/8
	(31)3K	3(10)/2

	(22)5D	5(42)/8
	(22)5F	-1(330)/8
	(22)5G	3(210)/8
	(22)5I	-1(2730)/8
(21)3G	(21)3G	-33(2145)/280
	(21)3H	-9(5005)/280
	(31)3P	69(105)/280
	(31)3D	-9(55)/28
	(31)3F	57(770)/560
	(31)3F'	45(2)/112
	(31)3G	27(55)/56
	(31)3H	-9(55)/28
	(31)3H'	-3(715)/56
	(31)3I	-9(26)/8
	(31)3K	3(3)/1
	(22)5S	3(35)/7
	(22)5D	-3(110)/56
	(22)5F	-9(770)/56
	(22)5G	-27(130)/56
	(22)5I	-3(910)/56
(21)3H	(21)3H	1(15015)/35
	(31)3P	3(770)/140
	(31)3D	-1(1155)/14
	(31)3F	3(30030)/560
	(31)3F'	-25(78)/112

(21)3H	(31)3G	3(1355)/56
	(31)3H	1(155)/2
	(31)3I	-1(345)/14
	(31)3K	3(238)/7
	(22)5D	-1(2310)/14
	(22)5F	-1(3080)/56
	(22)5G	3(2730)/55
	(22)5I	-1(390)/2
(31)3P	(31)3F	47(70)/550
	(31)3F'	9(22)/112
	(31)3G	-3(385)/280
	(31)3H	3(1430)/35
	(31)3H'	-23(110)/140
	(20)5G	-1(70)/7
	(22)5F	-33(70)/55
	(22)5G	5(770)/56
(31)3D	(31)3D	73(3)/42
	(31)3F	1(42)/55
	(31)3F'	-79(330)/840
	(31)3G	-27(15)/140
	(31)3H	-13(2145)/210
	(31)3H'	-9(165)/70
	(31)3I	1(195)/15
	(20)5D	5(3)/3
	(22)5D	-5(6)/6
	(22)5F	19(42)/84
	(22)5G	3(30)/4
	(22)5I	-4(273)/21
(31)3F	(31)3F	27(165)/80
	(31)3F'	1(21)/16
	(31)3G	-83(210)/560
	(31)3H	-37(330)/280
	(31)3H'	-3(4290)/560
	(31)3I	1(39)/8
	(31)3K	1(5)/2
	(20)5D	-5(42)/14
	(20)5G	2(1155)/21
	(22)5D	45(21)/56
	(22)5F	1(165)/8
	(22)5G	25(105)/168
	(22)5I	1(1365)/8
(31)3F'	(31)3F'	-2099(165)/18480
	(31)3G	-15(56)/1232
	(31)3H	-491(42)/1176
	(31)3H'	-39(546)/784
	(31)3I	307(15015)/9240
	(31)3K	9(77)/154
	(20)5D	-1(330)/42
	(20)5G	-10(3)/7
	(22)5D	7(165)/24

(31)3F'	(22)5F	-35(21)/24
	(22)5G	-35(35)/88
	(22)5I	35(429)/264
(31)3G	(31)3G	-3(2145)/3080
	(31)3H	-171(15)/140
	(31)3H'	-1(195)/280
	(31)3I	9(858)/88
	(31)3K	3(11)/11
	(20)5D	-1(15)/1
	(22)5S	-1(1155)/7
	(22)5D	-7(30)/8
	(22)5F	9(210)/55
	(22)5G	-3(4290)/88
	(22)5I	-17(30030)/616
(31)3H	(31)3H	-529(15015)/19110
	(31)3H'	-5(1155)/98
	(31)3I	1(6)/21
	(31)3K	12(442)/91
	(20)5D	1(2145)/21
	(20)5G	-2(330)/7
	(22)5D	-1(4290)/42
	(22)5F	1(330)/84
	(22)5G	31(30)/28
	(22)5I	2(210)/21
(31)3H'	(31)3H'	-3(15015)/245
	(31)3I	-3(78)/14
	(31)3K	-5(34)/7
	(20)5D	-2(165)/7
	(20)5G	-1(4290)/21
	(22)5D	-5(330)/14
	(22)5F	-3(4290)/56
	(22)5G	-53(390)/168
	(22)5I	1(2730)/14
(31)3I	(31)3I	19(72930)/1155
	(31)3K	36(187)/77
	(20)5D	-1(195)/3
	(22)5D	1(390)/6
	(22)5F	5(39)/12
	(22)5G	-15(429)/44
	(22)5I	5(102102)/231
(31)3K	(31)3K	-9(277134)/1001
	(20)5G	-5(2)/1
	(22)5F	3(5)/1
	(22)5G	-5(22)/11
	(22)5I	6(6545)/77
(00)5S	(20)5G	9(2)/2
(20)5D	(20)5D	2(15)/7
	(20)5G	5(56)/14
	(22)5D	5(30)/7
	(22)5F	-1(210)/2

TABLE [<22>(J)[S]αL‖ W^{14} ‖<22>(J')[S']α'L'] (SUITE 7)

(20)5J	(22)5G	5(6)/14
	(22)5I	-1(1356)/7
(20)5G	(20)5G	1(429)/14
	(22)5S	-5(42)/14
	(22)5D	-5(33)/7
	(22)5G	-10(39)/7
	(22)5I	5(273)/7
(22)5S	(22)5G	1(462)/7
(22)5D	(22)5D	-8(15)/7
	(22)5F	-1(105)/28
	(22)5G	-55(3)/28
	(22)5I	1(2730)/14
(22)5F	(22)5F	-1(33)/4
	(22)5G	45(21)/28
	(22)5I	1(273)/4
(22)5G	(22)5G	17(429)/308
	(22)5I	-25(3003)/308
(22)5I	(22)5I	-1(14556)/11

TABLE $[\langle 211\rangle (J)[S]\alpha L \| W^{(12)} \| \langle 211\rangle (J')[S']\alpha' L']$

$\langle 211\rangle$ (J)[S]L	$\langle 211\rangle$ (J')[S']L'	
(11)1P	(20)3D	-1(210)/10
	(31)3P	4(105)/35
	(31)3D	-3(35)/35
	(31)3F	3(70)/35
	(31)3F'	-2(22)/7
	(11)3P	-10(21)/21
	(11)3F	20(6)/21
	(21)3P	-4(105)/105
	(21)3D	4(42)/21
	(21)3F	-8(105)/105
(11)1F	(20)3D	4(10)/5
	(20)3G	-3(1)/1
	(31)3P	2(30)/35
	(31)3D	-12(15)/35
	(31)3F	-1(70)/5
	(31)3F'	-1(22)/7
	(31)3G	-2(35)/7
	(31)3H	-4(1001)/49
	(31)3H'	-4(77)/49
	(11)3P	20(6)/21
	(11)3F	10(6)/21
	(21)3P	-22(30)/105
	(21)3D	-4(2)/7
	(21)3F	-2(105)/15
	(21)3G	6(3)/7
	(21)3H	-4(33)/21
(21)1P	(22)3D	-5(21)/7
	(22)3F	-4(21)/7
	(31)3P	11(210)/140
	(31)3D	-1(70)/14
	(31)3F	-3(35)/35
	(31)3F'	1(11)/7
	(10)3D	-1(6)/1
	(11)3P	1(42)/21
	(11)3F	11(3)/21
	(21)3P	1(210)/60
	(21)3D	-1(21)/42
	(21)3F	-4(210)/105
(21)1D	(22)3S	-4(14)/7
	(22)3D	-1(10)/7
	(22)3F	-2(35)/7
	(22)3G	6(11)/7
	(31)3P	3(21)/14
	(31)3D	5(3)/7
	(31)3F	1(21)/14
	(31)3F'	-1(165)/14

(21)1D	(31)3G	1(330)/14
	(10)3D	3(35)/7
	(11)3P	2(105)/21
	(11)3F	-2(5)/7
	(21)3P	1(21)/42
	(21)3D	1(10)/7
	(21)3F	-1(14)/2
	(21)3G	1(30)/14
(21)1F	(22)3F	1(5)/1
	(31)3P	-2(210)/35
	(31)3D	-1(105)/14
	(31)3F	-9(10)/40
	(31)3F'	-1(154)/8
	(31)3G	3(231)/28
	(31)3H	-1(143)/14
	(31)3H'	3(11)/7
	(10)3D	2(1)/1
	(11)3P	2(42)/21
	(11)3F	1(42)/5
	(21)3P	-4(210)/105
	(21)3D	1(14)/2
	(21)3F	23(15)/30
	(21)3G	1(21)/4
	(21)3H	-2(231)/21
(21)1G	(22)3D	-4(30)/7
	(22)3F	4(210)/35
	(22)3G	-9(6)/7
	(22)3I	-4(1365)/35
	(31)3D	15(1)/14
	(31)3F	-9(14)/56
	(31)3F'	9(110)/56
	(31)3G	99(5)/140
	(31)3H	3(715)/70
	(31)3H'	-9(55)/35
	(10)3D	-2(105)/7
	(11)3F	3(30)/14
	(21)3D	1(30)/14
	(21)3F	-1(21)/4
	(21)3G	9(55)/140
	(21)3H	-2(1155)/35
(21)1H	(22)3F	2(2310)/35
	(22)3G	6(14)/7
	(22)3I	-1(65)/5
	(31)3F	1(154)/7
	(31)3F'	1(10)/7
	(31)3G	2(105)/35
	(31)3H	-1(110)/10
	(31)3H'	-1(1430)/20
	(31)3I	1(1365)/14
	(31)3K	1(210)/7

(21)1H	(11)3F	1(330)/21
	(21)3F	-2(231)/21
	(21)3G	2(1155)/35
	(21)3H	1(3003)/60
(31)1P	(31)3P	-9(70)/140
	(31)3D	-1(210)/14
	(31)3F	9(105)/35
	(31)3F'	1(33)/7
	(11)3P	-3(14)/7
	(11)3F	-3(1)/7
	(21)3P	33(70)/140
	(21)3D	-9(7)/14
	(21)3F	-3(70)/35
(31)1D	(31)3P	1(210)/14
	(31)3D	-5(30)/14
	(31)3F	-1(210)/28
	(31)3F'	5(55)/28
	(31)3G	-5(33)/14
	(11)3P	-2(42)/7
	(11)3F	-9(2)/7
	(21)3P	1(210)/14
	(21)3D	15(1)/7
	(21)3F	3(35)/14
	(21)3G	15(3)/14
(31)1F	(31)3P	9(105)/35
(31)1F'	(31)3P	1(33)/7
	(31)3D	-5(55)/28
	(31)3F	1(77)/8
	(31)3F'	75(5)/56
	(31)3G	-59(30)/280
	(31)3H	-87(910)/980
	(31)3H'	-19(70)/490
	(11)3P	1(165)/7
	(11)3F	1(165)/14
	(21)3P	1(33)/7
	(21)3D	3(55)/14
	(21)3F	-1(462)/8
	(31)3D	1(210)/28
	(31)3F	33(5)/40
	(31)3F'	1(77)/8
	(31)3G	-3(462)/56
	(31)3H	1(286)/28
	(31)3H'	-3(22)/14
	(11)3P	-3(21)/7
	(11)3F	1(21)/2
	(21)3P	-3(105)/35
	(21)3D	-3(7)/14
	(21)3F	-9(30)/40
	(21)3G	9(42)/56
	(21)3H	1(462)/7

(31)1F'	(21)3G	-9(330)/55
	(21)3H	1(30)/7
(31)1G	(31)3D	-5(33)/14
	(31)3F	3(462)/56
	(31)3F'	59(30)/280
	(31)3G	45(165)/308
	(31)3H	1(195)/14
	(31)3H'	-3(15)/7
	(31)3I	-4(2145)/55
	(11)3F	-3(110)/14
	(21)3D	3(110)/14
	(21)3F	-9(77)/28
	(21)3G	99(15)/140
	(21)3H	-5(35)/55
(31)1H	(31)3F	1(286)/28
	(31)3F'	-87(910)/980
	(31)3G	-1(195)/14
	(31)3H	-27(10010)/1274
	(31)3H'	-1(770)/98
	(31)3I	-31(15)/35
	(31)3K	10(390)/91
	(11)3F	1(3003)/49
	(21)3F	-1(429)/14
	(21)3G	-3(2145)/70
	(21)3H	-1(330)/10

(31)1H'	(31)3F	-3(22)/14
	(31)3F'	-19(70)/490
	(31)3G	3(15)/7
	(31)3H	-1(770)/98
	(31)3H'	9(10010)/196
	(31)3I	-1(195)/70
	(31)3K	-3(30)/7
	(11)3F	1(2310)/49
	(21)3F	3(33)/7
	(21)3G	9(165)/35
	(21)3H	-1(4290)/20
(31)1I	(31)3G	-4(2145)/55
	(31)3H	31(15)/35
	(31)3H'	1(195)/70
	(31)3I	4(4290)/77
	(31)3K	8(15)/7
	(21)3H	-3(455)/14
(31)1K	(31)3H	10(390)/91
	(31)3H'	-3(30)/7
	(31)3I	-8(15)/7
	(31)3K	9(2210)/91
	(21)3H	3(70)/7
(20)3D	(20)3D	1(15)/7
	(20)3G	-4(3)/7
	(22)3S	-6(105)/35

(20)3D	(22)3D	12(3)/7		(21)3D	2(21)/7
	(22)3G	-3(330)/35		(21)5D	2(70)/7
	(31)3P.	12(70)/35	(22)3D	(22)3D	-3(15)/14
	(31)3F	-6(70)/35		(22)3F	1(210)/7
	(31)3F'	-6(22)/7		(22)3G	1(66)/7
	(11)3P	3(14)/7		(31)3P	3(14)/28
	(11)3F	-8(6)/7		(31)3D	3(2)/2
	(11)5P	1(6)/1		(31)3F	-6(14)/7
	(11)5F	-8(14)/7		(21)3P	-15(14)/28
(20)3G	(20)3G	-1(330)/7		(21)3D	1(15)/14
	(22)3D	-4(15)/7		(21)3G	6(5)/7
	(22)3F	-2(105)/5		(21)5P	-5(105)/14
	(22)3G	-2(3)/7		(21)5D	5(2)/14
	(22)3I	2(2730)/35		(21)5G	10(6)/7
	(31)3D	2(2)/1	(22)3F	(22)3F	3(10)/4
	(31)3F	-6(7)/7		(22)3G	-1(462)/28
	(31)3F'	-2(55)/35		(31)3P	3(14)/7
	(31)3G	-6(10)/5		(31)3D	-15(7)/14
	(31)3H	2(1430)/35		(31)3F	-1(6)/1
	(31)3H'	-12(110)/35		(31)3G	-9(385)/70
	(31)3I	-2(130)/5		(31)3H	3(2145)/70
	(11)3F	6(15)/7		(31)3H'	-2(165)/35
	(11)5F	6(35)/7		(21)3P	3(14)/7
(22)3G	(22)3D	2(21)/7		(21)3D	-1(210)/14
	(31)3D	6(70)/35		(21)3F	-3(1)/2

TABLE [<211>(J)[S]αL ‖W^{12}‖<211>(J')[S']α'L'] (SUITE 5)

(22)3F	(21)3G	5(35)/35		(31)3H'	3(910)/140
	(21)3H	-3(385)/35		(31)3I	9(5005)/154
	(21)5P	2(105)/7		(31)3K	-5(70)/7
	(21)5D	-5(7)/7		(21)3G	3(910)/35
	(21)5F	-1(30)/2		(21)3H	-1(390)/20
	(21)5G	2(42)/7		(21)5G	2(273)/7
	(21)5H	-1(462)/7		(21)5H	-1(13)/2
(22)3D	(22)3G	-25(330)/308	(31)3P	(31)3P	3(35)/28
	(22)3I	-4(3003)/77		(31)3D	1(105)/70
	(31)3D	1(55)/10		(31)3F	-3(210)/14
	(31)3F	3(770)/28		(31)3F'	1(56)/14
	(31)3F'	-7(2)/4		(11)3P	-3(7)/7
	(31)3G	-6(11)/11		(11)3F	-3(2)/14
	(31)3H	13(13)/14		(21)3P	33(35)/140
	(31)3H'	24(1)/7		(21)3D	-9(14)/28
	(31)3I	-2(145)/11		(21)3F	-5(35)/35
	(21)3D	-3(65)/14		(11)5P	-1(3)/1
	(21)3F	27(1)/14		(11)5F	-1(42)/14
	(21)3H	3(21)/7		(21)5P	11(42)/28
	(21)5D	-3(55)/7		(21)5D	-3(105)/14
	(21)5G	9(30)/14		(21)5F	-2(42)/7
	(21)5H	3(70)/7	(31)3D	(31)3D	6(15)/7
(22)3I	(22)3I	1(2145)/22		(31)3F	1(105)/140
	(31)3G	9(10010)/385		(31)3F'	-9(33)/28
	(31)3H	51(70)/70		(31)3G	5(56)/28

(31)3D	(11)3P	-2(21)/7
	(11)3F	-9(1)/7
	(21)3P	1(105)/14
	(21)3D	15(2)/14
	(21)3F	3(70)/28
	(21)3G	15(5)/28
	(11)5P	-2(1)/1
	(11)5F	-3(21)/7
	(21)5P	5(14)/14
	(21)5D	5(15)/7
	(21)5F	5(21)/14
	(21)5G	13(5)/14
(31)3F	(31)3F	-11(10)/15
	(31)3F'	1(154)/16
	(31)3G	9(231)/56
	(31)3H	-5(143)/28
	(31)3H'	1(11)/14
	(11)3P	-3(42)/14
	(11)3F	1(42)/4
	(21)3P	-3(210)/70
	(21)3D	-3(14)/28
	(21)3F	-9(15)/40
	(21)3G	9(21)/55
	(21)3H	1(231)/7
	(11)5P	-3(2)/2
	(11)5F	7(2)/4
	(21)5P	-3(7)/7
	(21)5D	-1(105)/14
	(21)5F	-9(2)/8
	(21)5G	9(70)/55
	(21)5H	1(770)/7
(31)3F'	(31)3F'	-93(10)/112
	(31)3G	-31(15)/280
	(31)3H	123(455)/980
	(31)3H'	233(35)/490
	(11)3P	1(330)/14
	(11)3F	1(330)/28
	(21)3P	1(66)/14
	(21)3D	3(110)/28
	(21)3F	-1(231)/8
	(21)3G	-9(165)/56
	(21)3H	1(15)/7
	(11)5P	1(770)/14
	(11)5F	1(770)/28
	(21)5P	1(55)/7
	(21)5D	5(33)/14
	(21)5F	-1(770)/8
	(21)5G	-45(22)/56
	(21)5H	5(2)/7
(31)3G	(31)3G	237(330)/3080

(31)3G	(31)3H	-1(290)/23	(31)3H'	(31)3H'	1(5005)/980
	(31)3H'	57(30)/70		(31)3I	17(390)/140
	(31)3I	2(4290)/55		(31)3K	9(15)/7
	(11)3F	-3(55)/14		(11)3F	1(1155)/49
	(21)3D	3(55)/14		(21)3F	3(66)/14
	(21)3F	-9(154)/55		(21)3G	9(330)/70
	(21)3G	99(30)/280		(21)3H	-1(2145)/20
	(21)3H	-3(70)/35		(11)5F	1(55)/7
	(11)5F	-1(1155)/14		(21)5F	3(55)/7
	(21)5D	5(66)/14		(21)5G	9(11)/7
	(21)5F	-3(1155)/28		(21)5H	-1(286)/4
	(21)5G	99(1)/28	(31)3I	(31)3I	3(2145)/154
	(21)5H	-2(21)/7		(31)3K	-2(30)/7
(31)3H	(31)3H	72(5005)/3185		(21)3H	-3(910)/28
	(31)3H'	-11(385)/490		(21)5H	-5(273)/14
	(31)3I	9(30)/70	(31)3K	(31)3K	5(1105)/91
	(31)3K	-2(195)/91		(21)3H	3(35)/7
	(11)3F	1(15015)/49		(21)5H	5(42)/7
	(21)3F	-1(858)/28	(10)3D	(10)3D	-1(15)/2
	(21)3G	-3(4290)/140		(21)3P	3(1)/1
	(21)3H	-1(165)/10		(21)3D	3(210)/14
	(11)5F	1(715)/7		(21)3F	-1(6)/1
	(21)5F	-1(715)/14		(21)3G	-3(70)/7
	(21)5G	-3(143)/14		(21)5P	-1(30)/2
	(21)5H	-1(22)/2		(21)5D	-15(7)/14

(10)3D	(21)5F	1(5)/1
	(21)5G	5(21)/7
(11)3P	(11)3P	-17(35)/70
	(11)3F	17(10)/35
	(21)3P	1(7)/7
	(21)3D	-1(70)/7
	(21)3F	2(7)/7
	(11)5P	5(15)/6
	(11)5F	-5(210)/21
	(21)5P	1(210)/21
	(21)5D	-10(21)/21
	(21)5F	2(210)/21
(11)3F	(11)3F	17(10)/70
	(21)3P	11(2)/14
	(21)3D	1(30)/7
	(21)3F	1(7)/2
	(21)3G	-9(5)/14
	(21)3H	1(55)/7
	(11)5P	-5(210)/21
	(11)5F	-5(210)/42
	(21)5P	11(15)/21
	(21)5D	10(1)/7
	(21)5F	1(210)/6
	(21)5G	-15(6)/14
	(21)5H	5(66)/21

(21)3P	(21)3P	31(35)/140
	(21)3D	-1(14)/4
	(21)3F	8(35)/35
	(11)5P	1(3)/3
	(11)5F	11(42)/42
	(21)5P	1(42)/12
	(21)5D	-1(105)/42
	(21)5F	-4(42)/21
(21)3D	(21)3D	-1(15)/14
	(21)3F	11(21)/14
	(21)3G	9(5)/14
	(11)5P	1(30)/3
	(11)5F	-1(70)/7
	(21)5P	1(105)/42
	(21)5D	5(2)/7
	(21)5F	-1(70)/2
	(21)5G	5(5)/14
(21)3F	(21)3F	-1(10)/40
	(21)3G	-27(14)/56
	(21)3H	2(154)/7
	(11)5P	2(3)/3
	(11)5F	7(3)/6
	(21)5P	-4(42)/21
	(21)5D	1(70)/2
	(21)5F	23(3)/12

TABLE $[\langle 211\rangle(J)[S]\alpha L \| W^{(12)} \| \langle 211\rangle(J')[S']\alpha' L']$ (SUITE 9)

(21)3F	(21)5G	1(105)/4
	(21)5H	-2(1155)/21
(21)3G	(21)3G	-3(330)/55
	(11)5F	3(105)/14
	(21)5D	5(6)/14
	(21)5F	-1(105)/4
	(21)5G	9(11)/28
	(21)5H	-2(231)/7
(21)3H	(21)3H	-1(6006)/28
	(11)5F	1(1155)/21
	(21)5F	-2(1155)/21
	(21)5G	2(231)/7
	(21)5H	1(6006)/12
(11)5P	(11)5P	-1(7)/2
	(11)5F	1(2)/1
	(21)5P	1(2)/1
	(21)5D	-2(5)/1
	(21)5F	2(2)/1
(11)5F	(11)5F	1(2)/2
	(21)5P	11(7)/7
	(21)5D	2(105)/7
	(21)5F	7(2)/2
	(21)5G	-9(70)/14
	(21)5H	1(770)/7
(21)5P	(21)5P	19(7)/14
	(21)5D	-2(70)/7
	(21)5F	4(7)/7
(21)5D	(21)5D	5(3)/14
	(21)5F	2(105)/7
	(21)5G	30(1)/7
(21)5F	(21)5F	11(2)/4
	(21)5G	-3(70)/28
	(21)5H	1(770)/7
(21)5G	(21)5G	-3(66)/28
	(21)5H	-3(154)/7
(21)5H	(21)5H	1(1001)/14

TABLE [<211>(J)[S]αL ‖ W^{14} ‖<211>(J')[S']α'L']

<211> (J)[S]L	<211> (J')[S']L'	
(11)1P	(20)3G	-3(35)/5
	(31)3F	1(210)/21
	(31)3F'	1(66)/7
	(31)3G	2(1155)/35
	(31)3H'	-2(330)/15
	(11)3F	-10(2)/7
	(21)3F	-2(35)/7
	(21)3G	2(105)/35
	(21)3H	2(770)/35
(11)1F	(20)3D	-3(1)/1
	(20)3G	-3(110)/10
	(31)3P	-2(10)/7
	(31)3D	-4(5)/21
	(31)3F'	-15(3)/21
	(31)3G	-4(30)/35
	(31)3H	4(2310)/147
	(31)3H'	-2(30030)/245
	(31)3I	4(273)/21
	(31)3K	-4(35)/7
	(11)3P	-10(2)/7
	(11)3F	-10(11)/7
	(21)3P	-2(10)/7
	(21)3D	-4(5)/7

<211> (J)[S]L	<211> (J')[S']L'	
	(21)3G	-4(330)/35
	(21)3H	-2(1430)/35
(21)1P	(22)3F	-9(7)/14
	(22)3G	-3(77)/14
	(31)3F	17(105)/168
	(31)3F'	17(33)/56
	(31)3G	1(2310)/56
	(31)3H'	1(165)/6
	(11)3F	5(1)/7
	(21)3F	13(70)/56
	(21)3G	-1(210)/280
	(21)3H	1(385)/10
(21)1D	(22)3D	-10(2)/7
	(22)3F	11(14)/14
	(22)3G	-9(10)/14
	(22)3I	-2(91)/7
	(31)3D	-5(15)/21
	(31)3F	-5(210)/56
	(31)3F'	19(66)/168
	(31)3G	27(3)/28
	(31)3H	-1(429)/21
	(31)3H'	2(33)/7
	(31)3I	-1(39)/3

(21)1D	(10)3D	-5(7)/7
	(11)3F	-5(2)/7
	(21)3D	-15(2)/14
	(21)3F	-1(35)/4
	(21)3G	-9(33)/28
	(21)3H	-1(77)/7
(21)1F	(22)3D	-1(35)/2
	(22)3F	1(11)/2
	(22)3G	-3(7)/2
	(22)3I	1(91)/2
	(31)3P	-5(70)/56
	(31)3D	-5(42)/28
	(31)3F	-1(165)/8
	(31)3F'	1(21)/8
	(31)3G	1(210)/56
	(31)3H	3(330)/28
	(31)3H'	1(4290)/56
	(31)3I	1(39)/4
	(31)3K	1(5)/1
	(10)3D	1(10)/1
	(11)3P	5(14)/14
	(21)3P	13(70)/56
	(21)3D	1(35)/4
	(21)3F	1(110)/8
	(21)3G	-1(2310)/40
	(21)3H	-1(10010)/280
(21)1G	(22)3S	-2(42)/7
	(22)3D	1(33)/14
	(22)3F	3(231)/14
	(22)3G	9(39)/14
	(22)3I	1(273)/14
	(31)3P	23(210)/280
	(31)3D	-3(110)/28
	(31)3F	19(385)/280
	(31)3F'	15(1)/56
	(31)3G	9(130)/56
	(31)3H	-3(110)/28
	(31)3H'	-1(1430)/56
	(31)3I	-3(13)/4
	(31)3K	1(6)/1
	(10)3D	1(462)/7
	(11)3P	1(42)/14
	(11)3F	-2(33)/7
	(21)3P	1(210)/280
	(21)3D	-9(33)/28
	(21)3F	1(2310)/40
	(21)3G	-3(1430)/56
	(21)3H	-1(30030)/56
(21)1H	(22)3D	2(77)/7
	(22)3F	1(1001)/14

(21)1H	(22)3G	-3(91)/14
	(22)3I	2(13)/1
	(31)3P	1(385)/70
	(31)3D	-1(2310)/42
	(31)3F	1(15015)/280
	(31)3F'	-25(39)/168
	(31)3G	1(2730)/56
	(31)3H	1(330)/5
	(31)3I	-1(275)/21
	(31)3K	2(119)/7
	(10)3D	-1(22)/1
	(11)3P	-1(77)/7
	(11)3F	1(143)/7
	(21)3P	1(385)/10
	(21)3D	1(77)/7
	(21)3F	-1(15015)/280
	(21)3G	1(30030)/56
(31)1P	(31)3F	19(35)/56
	(31)3F'	9(11)/56
	(31)3G	-27(770)/280
	(31)3H	-3(715)/35
	(31)3H'	1(55)/70
	(11)3F	5(3)/7
	(21)3F	-5(210)/56
	(21)3G	-69(70)/280
(31)1D	(21)3H	1(1155)/70
	(31)3D	-125(6)/84
	(31)3F	-5(21)/28
	(31)3F'	-13(165)/84
	(31)3G	-3(30)/28
	(31)3H	1(4290)/84
	(31)3H'	-1(330)/14
	(31)3I	-1(390)/6
	(11)3F	-2(5)/7
	(21)3D	-5(5)/7
	(21)3F	15(14)/28
	(21)3G	-3(330)/28
	(21)3H	1(770)/14
(31)1F	(31)3P	19(35)/56
	(31)3D	5(21)/28
	(31)3F	-1(330)/16
	(31)3F'	1(42)/16
	(31)3G	93(105)/280
	(31)3H	41(165)/140
	(31)3H'	-19(2145)/280
	(31)3I	1(78)/8
	(31)3K	1(10)/2
	(11)3P	-5(7)/14
	(21)3P	17(35)/56
	(21)3D	15(70)/56

(31)1F	(21)3F	-3(55)/8
	(21)3G	-19(1155)/280
	(21)3H	3(5005)/280
(31)1F'	(31)3P	9(11)/56
	(31)3D	13(156)/84
	(31)3F	1(42)/16
	(31)3F'	73(330)/3696
	(31)3G	-351(33)/616
	(31)3H	419(21)/588
	(31)3H'	73(273)/392
	(31)3I	-17(3003)/1848
	(31)3K	9(154)/154
	(11)3P	-3(55)/14
	(11)3F	4(10)/7
	(21)3P	51(11)/56
	(21)3D	-19(22)/56
	(21)3F	3(7)/8
	(21)3G	-15(3)/56
	(21)3H	-26(13)/56
(31)1G	(31)3P	27(770)/280
	(31)3D	-3(30)/28
	(31)3F	-93(105)/280
	(31)3F'	351(33)/616
	(31)3G	9(4290)/616
	(31)3H	9(30)/28
	(31)3H'	3(390)/56
	(31)3I	-3(429)/44
	(31)3K	-9(22)/11
	(11)3P	3(154)/14
	(11)3F	-6(1)/7
	(21)3P	-3(770)/56
	(21)3D	81(1)/28
	(21)3F	-3(70)/56
	(21)3G	9(390)/56
	(21)3H	-3(910)/56
(31)1H	(31)3P	-3(715)/35
	(31)3D	-1(4290)/84
	(31)3F	41(165)/140
	(31)3F'	419(21)/588
	(31)3G	-9(30)/28
	(31)3H	-23(30030)/7644
	(31)3H'	5(2310)/98
	(31)3I	-59(3)/21
	(31)3K	5(221)/91
	(11)3F	-10(77)/49
	(21)3D	1(143)/7
	(21)3F	9(110)/28
	(21)3G	3(330)/28
	(21)3H	1(110)/2
(31)1H'	(31)3P	1(55)/70

(31)1H'	(31)3D	1(330)/14
	(31)3F	-19(2145)/230
	(31)3F'	75(273)/392
	(31)3G	-3(390)/55
	(31)3H	5(2310)/98
	(31)3H'	1(30030)/49
	(31)3I	1(39)/7
	(31)3K	8(17)/7
	(11)3P	1(11)/1
	(11)3F	3(1001)/49
	(21)3P	1(55)/2
	(21)3D	-6(11)/7
	(21)3F	3(1430)/56
	(21)3G	1(4290)/56
(31)1I	(31)3D	-1(390)/6
	(31)3F	-1(78)/8
	(31)3F'	17(30030)/1848
	(31)3G	-3(429)/44
	(31)3H	59(3)/21
	(31)3H'	-1(39)/7
	(31)3I	-4(36465)/252
	(31)3K	-9(374)/77
	(11)3F	1(910)/7
	(21)3D	-1(13)/1
	(21)3F	-3(13)/4
	(21)3G	-3(39)/4
	(21)3H	1(91)/7
(31)1K	(31)3F	1(10)/2
	(31)3F'	9(154)/154
	(31)3G	9(22)/11
	(31)3H	5(221)/91
	(31)3H'	8(17)/7
	(31)3I	9(374)/77
	(31)3K	15(138567)/1001
	(11)3F	5(42)/7
	(21)3F	1(15)/1
	(21)3G	-3(2)/1
	(21)3H	2(357)/7
(20)3D	(20)3D	-4(3)/7
	(20)3G	-1(330)/7
	(22)3D	-4(15)/7
	(22)3F	2(105)/5
	(22)3G	-2(3)/7
	(22)3I	2(2730)/35
	(31)3D	-2(2)/1
	(31)3F	-5(7)/7
	(31)3F'	-2(3)/35
	(31)3G	8(10)/5
	(31)3H	2(1430)/35
	(31)3H'	-12(110)/35

(20)3D	(31)3I	2(130)/5
	(11)3F	6(15)/7
	(11)5F	6(35)/7
(20)3G	(20)3G	-1(2145)/35
	(22)3S	2(21)/7
	(22)3D	2(55)/7
	(22)3G	4(78)/7
	(22)3I	-2(546)/7
	(31)3P	-4(105)/35
	(31)3F	4(770)/35
	(31)3F'	-12(2)/7
	(31)3H	-24(55)/35
	(31)3H'	-4(715)/35
	(31)3K	-4(3)/1
	(11)3P	6(21)/7
	(11)3F	3(66)/7
	(11)5P	6(1)/1
	(11)5F	3(154)/7
(22)3S	(22)3G	1(2310)/35
	(31)3G	-3(77)/7
	(21)3G	3(7)/7
	(21)5G	1(210)/7
(22)3D	(22)3D	-5(3)/7
	(22)3F	-1(21)/28
	(22)3G	-13(15)/28
	(22)3I	1(546)/14
	(31)3D	-1(10)/2
	(31)3F	-27(35)/56
	(31)3F'	-7(11)/8
	(31)3G	-21(2)/8
	(31)3H	1(286)/14
	(31)3H'	15(22)/14
	(31)3I	1(26)/2
	(21)3D	5(3)/7
	(21)3F	-1(210)/8
	(21)3G	-3(22)/56
	(21)3H	1(462)/14
	(21)5D	5(10)/7
	(21)5F	-5(7)/4
	(21)5G	-1(165)/28
	(21)5H	1(385)/7
(22)3F	(22)3F	-1(165)/20
	(22)3G	9(105)/28
	(22)3I	1(1365)/20
	(31)3P	-33(42)/56
	(31)3D	-19(70)/140
	(31)3F	3(11)/8
	(31)3F'	-7(35)/8
	(31)3G	-27(14)/56
	(31)3H	1(22)/28

(22)3F	(31)3H'	-9(285)/56
	(31)3I	-1(55)/4
	(31)3K	5(3)/1
	(21)3P	9(42)/55
	(21)3D	11(21)/28
	(21)3F	-1(55)/8
	(21)3G	9(154)/55
	(21)3H	-1(6006)/55
	(21)5P	9(35)/28
	(21)5D	11(70)/28
	(21)5F	-1(55)/4
	(21)5G	3(1155)/28
	(21)5H	-1(5005)/28
(22)3G	(22)3G	17(2145)/1540
	(22)3I	-5(15015)/308
	(31)3P	-5(462)/55
	(31)3D	9(2)/4
	(31)3F	-25(7)/55
	(31)3F'	21(55)/88
	(31)3G	-9(286)/88
	(31)3H	-93(2)/28
	(31)3H'	53(25)/55
	(31)3I	-9(715)/44
	(31)3K	1(330)/11
	(21)3P	-3(462)/55
	(21)3D	9(15)/28
	(21)3F	-3(42)/8
	(21)3G	-27(26)/56
	(21)3H	-3(546)/56
	(21)5P	-3(385)/28
	(21)5D	45(2)/28
	(21)5F	-3(35)/4
	(21)5G	-9(195)/28
	(21)5H	-3(455)/28
(22)3I	(22)3I	-1(72930)/55
	(31)3D	-4(455)/35
	(31)3F	-3(91)/8
	(31)3F'	-7(715)/88
	(31)3G	-51(2002)/616
	(31)3H	-2(14)/7
	(31)3H'	-3(182)/14
	(31)3I	1(170170)/77
	(31)3K	-5(3927)/77
	(21)3D	1(546)/14
	(21)3F	1(546)/8
	(21)3G	-3(182)/56
	(21)3H	1(78)/2
	(21)5D	1(455)/7
	(21)5F	1(455)/4
	(21)5G	-1(1365)/28

(22)3I	(21)3H	1(65)/1		(21)3H	1(385)/14
(31)3P	(31)3F	47(70)/55		(11)5F	-1(210)/21
	(31)3F'	9(22)/112		(21)5D	-25(3)/21
	(31)3G	-3(385)/280		(21)5F	5(210)/28
	(31)3H	3(1430)/35		(21)5G	-15(22)/28
	(31)3H'	-23(110)/140		(21)5H	5(462)/42
	(11)3F	5(6)/14	(31)3F	(31)3F	27(165)/80
	(21)3F	-5(105)/56		(31)3F'	1(21)/16
	(21)3G	-69(35)/280		(31)3G	-83(210)/560
	(21)3H	1(2310)/140		(31)3H	-37(330)/280
	(11)5F	5(14)/14		(31)3H'	-3(4290)/560
	(21)5F	-25(14)/56		(31)3I	1(39)/8
	(21)5G	-23(42)/56		(31)3K	1(5)/2
	(21)5H	1(7)/14		(11)3P	-5(14)/28
(31)3D	(31)3D	73(3)/42		(21)3P	17(70)/112
	(31)3F	1(42)/56		(21)3D	15(35)/56
	(31)3F'	-79(330)/840		(21)3F	-3(110)/16
	(31)3G	-27(15)/140		(21)3G	-19(2310)/560
	(31)3H	-13(2145)/210		(21)3H	3(10010)/560
	(31)3H'	-9(165)/70		(11)5P	-5(6)/12
	(31)3I	1(195)/15		(21)5P	85(21)/168
	(11)5F	-1(10)/7		(21)5D	25(42)/56
	(21)3D	-5(10)/14		(21)5F	-5(33)/8
	(21)3F	15(7)/28		(21)5G	-19(77)/56
	(21)3G	-3(165)/28		(21)5H	1(3003)/56

(31)3F'	(31)3F'	-2099(155)/18480
	(31)3G	-15(55)/1232
	(31)3H	-491(42)/1176
	(31)3H'	-39(545)/784
	(31)3I	307(15015)/9240
	(31)3K	9(77)/154
	(11)3P	-3(110)/28
	(11)3F	4(5)/7
	(21)3P	51(22)/112
	(21)3D	-19(11)/56
	(21)3F	3(14)/15
	(21)3G	-15(5)/112
	(21)3H	-25(25)/112
	(11)5P	-1(2310)/28
	(11)5F	4(105)/21
	(21)5P	17(165)/56
	(21)5D	-19(330)/168
	(21)5F	1(105)/8
	(21)5G	-15(5)/66
	(21)5H	-25(195)/168
(31)3G	(31)3G	-3(2145)/3080
	(31)3H	-171(15)/140
	(31)3H'	-1(195)/280
	(31)3I	9(858)/88
	(31)3K	3(11)/11
	(11)3P	3(77)/14
	(11)3F	-3(2)/7
	(21)3P	-3(385)/56
	(21)3D	81(2)/56
	(21)3F	-3(35)/56
	(21)3G	9(195)/56
	(21)3H	-3(455)/56
	(11)5P	1(33)/2
	(11)5F	-1(42)/7
	(21)5P	-5(462)/56
	(21)5D	27(15)/28
	(21)5F	-5(42)/56
	(21)5G	45(25)/56
	(21)5H	-5(546)/56
(31)3H	(31)3H	-529(15015)/19110
	(31)3H'	-3(1155)/98
	(31)3I	1(5)/21
	(31)3K	12(442)/91
	(11)3F	-5(154)/49
	(21)3D	1(286)/14
	(21)3F	9(55)/28
	(21)3G	3(165)/28
	(21)3H	1(55)/2
	(11)5F	-5(56)/21
	(21)5D	1(2145)/21

(31)3H	(21)5F	15(55)/28
	(21)5G	15(22)/28
	(21)5H	5(55)/6
(31)3H'	(31)3H'	-3(15015)/245
	(31)3I	-3(78)/14
	(31)3K	-5(34)/7
	(11)3P	1(22)/2
	(11)3F	3(2002)/98
	(21)3P	1(110)/4
	(21)3D	-3(22)/7
	(21)3F	3(715)/55
	(21)3G	1(2145)/55
	(11)5P	1(462)/6
	(11)5F	1(858)/14
	(21)5P	5(33)/6
	(21)5D	-2(165)/7
	(21)5F	5(858)/56
	(21)5G	5(286)/55
(31)3I	(31)3I	19(72930)/1155
	(31)3K	36(187)/77
	(11)3F	1(455)/7
	(21)3D	-1(25)/2
	(21)3F	-3(25)/8
	(21)3G	-3(75)/8
	(21)3H	1(182)/14
	(11)5F	1(195)/3
	(21)5D	-1(195)/3
	(21)5F	-1(195)/4
	(21)5G	-3(65)/4
	(21)5H	1(1365)/21
(31)3K	(31)3K	-9(277134)/1001
	(11)3F	5(21)/7
	(21)3F	1(30)/2
	(21)3G	-3(1)/1
	(21)3H	1(714)/7
	(11)5F	5(1)/1
	(21)5F	5(1)/1
	(21)5G	-1(30)/1
	(21)5H	2(595)/7
(10)3D	(10)3D	-3(3)/2
	(21)3D	-5(42)/14
	(21)3F	-1(15)/1
	(21)3G	3(77)/7
	(21)3H	1(33)/1
	(21)5D	5(35)/14
	(21)5F	5(2)/2
	(21)5G	-1(2310)/14
	(21)5H	-1(110)/2
(11)3P	(11)3F	-17(30)/70
	(21)3F	5(21)/14

(11)3P	(21)3G	-3(7)/14
	(21)3H	-1(462)/14
	(11)5F	5(70)/14
	(21)5F	5(70)/14
	(21)5G	-1(210)/14
	(21)5H	-1(385)/7
(11)3F	(11)3F	-17(165)/70
	(21)3P	5(5)/14
	(21)3D	5(3)/7
	(21)3G	3(22)/7
	(21)3H	1(858)/14
	(11)5P	5(70)/14
	(11)5F	5(385)/14
	(21)5P	5(5)/7
	(21)5D	5(10)/7
	(21)5G	2(165)/7
	(21)5H	1(715)/7
(21)3P	(21)3F	-57(105)/230
	(21)3G	3(35)/5
	(21)3H	-1(2310)/23
	(11)5F	5(14)/14
	(21)5F	65(14)/56
	(21)5G	-1(42)/56
	(21)5H	1(77)/2
(21)3D	(21)3D	2(3)/7
	(21)3F	1(210)/56
	(21)3G	45(22)/56
	(11)5F	-5(7)/7
	(21)5D	-15(10)/14
	(21)5F	-5(7)/4
	(21)5G	-9(165)/28
	(21)5H	-1(385)/7
(21)3F	(21)3F	1(165)/40
	(21)3G	3(385)/56
	(21)3H	-1(15015)/56
	(11)5P	5(1)/2
	(21)5P	65(14)/56
	(21)5D	5(7)/4
	(21)5F	5(22)/8
	(21)5G	-1(462)/8
	(21)5H	-1(2002)/56
(21)3G	(21)3G	-3(2145)/280
	(21)3H	3(5005)/40
	(11)5P	1(3)/2
	(11)5F	-1(462)/7
	(21)5P	1(42)/56
	(21)5D	-9(165)/28
	(21)5F	1(462)/8
	(21)5G	-15(286)/56
	(21)5H	-5(6006)/56

(21)3H	(21)3H	1(13015)/35
	(11)5P	-1(22)/2
	(11)5F	1(2002)/14
	(21)5P	1(77)/2
	(21)5D	1(385)/7
	(21)5F	-1(2002)/56
	(21)5G	5(6006)/56
(11)5P	(11)5F	-1(5)/2
	(21)5F	5(5)/2
	(21)5G	-3(2)/2
	(21)5H	-1(33)/1
(11)5F	(11)5F	-1(33)/2
	(21)5P	5(21)/7
	(21)5D	5(42)/7
	(21)5G	6(77)/7
	(21)5H	1(3003)/7
(21)5P	(21)5F	-1(21)/28
	(21)5G	51(7)/28
	(21)5H	1(462)/14
(21)5D	(21)5D	-11(15)/14
	(21)5F	-13(42)/28
	(21)5G	9(110)/28
	(21)5H	-1(2310)/14
(21)5F	(21)5F	3(33)/4
	(21)5G	-3(77)/28
	(21)5H	-3(3003)/28
(21)5G	(21)5G	-9(429)/28
	(21)5H	3(1001)/28
(21)5H	(21)5H	1(3003)/7

V. Classification des opérateurs biélectroniques et expression des corrections

A) Opérateurs biélectroniques

1°) Etude des opérateurs couplés en (x,k) = (0,2) intervenant dans Δ_q

Les considérations sur l'hermiticité ont montré qu'ils étaient construits à partir de $\langle 1^2 \rangle \otimes \{2\}$ et $\langle 2 \rangle \otimes \{2\}$

Les tables V et VII permettent de construire explicitement les combinaisons linéaires

$$\left[(\langle 1^2\rangle\langle 1^2\rangle)\sigma \times u\, \tau\, k\right] O^{xk} = \sum_{x_1 u_1 x_2 u_2} (\langle 1^2\rangle x_1 u_1 + \langle 1^2\rangle x_2 u_2 \,|\, \langle \sigma \rangle x\, u) \sum_{k_1 k_2} \langle u_1 k_1 + u_2 k_2 \,|\, u\, \tau\, k\rangle \left\{ W^{x_1 k_1} W^{x_2 k_2} \right\}^{xk} \quad (20)$$

Nous avons appelé O_i^{xk} les opérateurs construits à partir de $\langle 1^2 \rangle \langle 1^2 \rangle$ et

T_j^{xk} " " " de $\langle 2 \rangle \langle 2 \rangle$

L'ensemble des résultats est donné par les tables VIII et IX.

Les nombres k sont notés (k) et on a posé

$$W_s^{(xk_1, xk_2)02} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(W^{xk_1} W^{xk_2}\right)^{02} + \left(W^{xk_2} W^{xk_1}\right)^{02} \right]$$

Les C.C.G. calculés définissent une transformation unitaire exprimée par la formule (20) ci-dessus. L'inverse de la matrice est égale à la transposée et les tables VIII et IX permettent aussi bien d'exprimer les opérateurs classés en fonction des produits $\left\{ W^{x_1 k_1} W^{x_2 k_2} \right\}^{xk}$ que l'inverse.

L'expression (1) donnant Δ^{02} montre qu'on doit avoir k + k' pair, t pair et $x_i = 0$.

L'examen de la table IX montre que les opérateurs $\langle 2 \rangle \otimes \{2\}\ T^{02}$ s'expriment en fonction de produits $\left\{ W^{ok'} W^{ot} \right\}^{02}$ où k' et t sont impairs. Donc, aucun opérateur T^{02} ne participe à la correction Δ_q. On aurait pu le prévoir en remarquant que Δ_q s'exprime en fonction des $\left\{ W^{ok'} W^{ot} \right\}^{02}$ k' pair et t pair c'est-à-dire en fonction d'opérateurs du type (+ +) + donc en fonction seulement des opérateurs classés construits sur le pléthysme $\langle 1^2 \rangle \otimes \{2\}$ de type (+ +) +.

$(\langle 1^2\rangle\langle 1^2\rangle)\sigma u\, O^{02}$	$W^{(11,11)02}$	$W_s^{(11,13)02}$	$W^{(13,13)02}$	$W^{(02,02)02}$	$W_s^{(02,04)02}$	$W^{(04,04)02}$
$(\ )\langle 1^2\rangle(20)O_1^{02}$	$-\frac{(70)}{20}$	$\frac{(10)}{5}$	$\frac{(5)}{10}$	$-\frac{(10)}{28}$	$\frac{2}{7}$	$\frac{(55)}{14}$
$(\ )\langle 1^2\rangle(22)O_2^{02}$	$\frac{(7)}{5}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{3(2)}{10}$	$-\frac{3}{7}$	$\frac{(10)}{7}$	$-\frac{(22)}{14}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(10)O_3^{02}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{(7)}{5}$	$-\frac{(14)}{5}$	0	0	0
$(\ )\langle 2^2\rangle(20)O_4^{02}$	$\frac{(42)}{20}$	$-\frac{(6)}{5}$	$-\frac{(3)}{10}$	$-\frac{5(6)}{84}$	$\frac{2(15)}{21}$	$\frac{5(33)}{42}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(22)O_5^{02}$	$-\frac{(7)}{5}$	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{3(2)}{10}$	$-\frac{3}{7}$	$\frac{(10)}{7}$	$-\frac{(22)}{14}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(40)O_6^{02}$	0	0	0	$-\frac{2(66)}{21}$	$-\frac{(165)}{21}$	$\frac{2(3)}{21}$

Table VIII

$(\langle 2\rangle\langle 2\rangle)\sigma u\, T^{02}$	$W^{(01,01)02}$	$W_s^{(01,03)02}$	$W^{(03,03)02}$	$W_s^{(10,12)02}$	$W^{(12,12)02}$	$W_s^{(12,14)02}$	$W^{(14,14)02}$
$(\ )\langle 1^2\rangle(20)T_1^{02}$	$-\frac{(14)}{20}$	$\frac{(2)}{5}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{(5)}{5}$	$-\frac{3(2)}{28}$	$\frac{6(5)}{35}$	$\frac{3(11)}{14}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(10)T_2^{02}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{(7)}{5}$	$-\frac{(14)}{5}$	0	0	0	0
$(\ )\langle 2^2\rangle(20)T_3^{02}$	$\frac{(42)}{20}$	$-\frac{(6)}{5}$	$-\frac{(3)}{10}$	$\frac{(15)}{5}$	$\frac{(6)}{84}$	$-\frac{2(15)}{105}$	$-\frac{(33)}{42}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(22)T_4^{02}$	$\frac{(7)}{5}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{3(2)}{10}$	0	$-\frac{3}{7}$	$\frac{10}{7}$	$-\frac{(22)}{14}$
$(\ )\langle 2^2\rangle(40)T_5^{02}$	0	0	0	0	$-\frac{2(66)}{21}$	$-\frac{(165)}{21}$	$\frac{2(3)}{21}$
$(\ )\langle 4\rangle(20)T_6^{02}$	$-\frac{(14)}{10}$	$\frac{2(2)}{5}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{(5)}{5}$	$\frac{(2)}{14}$	$-\frac{4(5)}{35}$	$-\frac{(11)}{7}$
$(\ )\langle 4\rangle(22)T_7^{02}$	$\frac{(7)}{5}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{3(2)}{10}$	0	$\frac{3}{7}$	$-\frac{(10)}{7}$	$\frac{(22)}{14}$

Table IX

Le spin n'intervient pas et on peut prévoir qu'on doit pouvoir faire apparaître facilement dans l'expression des opérateurs classés complètement dans $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5 \supset R_3$, la classification $SO_5 \supset R_3$. La table VIII montre qu'il existe en effet des relations simples entre les opérateurs O_1 et O_4 d'une part et O_2 et O_5 d'autre part.
On peut écrire symboliquement en séparant les WW avec $x_i = 1$ et ceux avec $x_i = 0$

$$O_1^{o2} = A' + B'$$

$$O_4^{o2} = -(\tfrac{3}{5})\ A' + (\tfrac{5}{3})\ B'$$

$$O_2^{o2} = C' + D'$$

$$O_5^{o2} = C' - D' \qquad \text{relations qui nous conduisent à poser :}$$

$$O'^{o2}_1 = (\tfrac{3}{8})\ O_1^{o2} + (\tfrac{5}{8})\ O_4^{o2}$$

$$O'^{o2}_2 = \frac{1}{2} - O_2^{o2} + O_5^{o2}$$

$$O'^{o2}_3 = O_6^{o2}$$

Dans ces conditions les trois produits $(W^{ok'}\ W^{ok})^{02}$ qui interviennent dans Δ_q, et qui, dans la classification complète $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$, s'expriment en fonction de 5 opérateurs $(\sigma\ u)O^{o2}$ comme le montre la table IX, s'expriment maintenant en fonction des 3 opérateurs ainsi définis

$$W^{(02,02)02} = -\frac{(15)}{21}\ O'^{o2}_1 - \frac{9(2)}{21}\ O'^{o2}_2 - \frac{2}{21}\ (66)\ O'^{o2}_3$$

$$W^{(02,04)02}_S = \frac{4(6)}{21}\ O'^{o2}_1 + \frac{6(5)}{21}\ O'^{o2}_2 - \frac{(165)}{21}\ O'^{o2}_3$$

$$W^{(04,04)02} = \frac{(330)}{21}\ O'^{o2}_1 - \frac{3(11)}{21}\ O'^{o2}_2 + \frac{2(3)}{21}\ O'^{o2}_3$$

Table X

Pour comprendre ce que représente les opérateurs O'^{o2}_i écrivons les opérateurs O^{o2}_i en donnant le détail de leur expression en fonction des coefficients de Clebsch-Gordan de $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ et ceux de $SO_5 \supset R_3$

	$W^{11,11}$	$W^{11,13}$	$W^{13,13}$	$W^{02,02}$	$W^{02,04}$	$W^{04,04}$
$[\langle 1^2\rangle(20)]O^{o2}_1 = -\frac{1(10)}{4}$	$\frac{(7)}{5}$	$-\frac{4}{5}$	$\frac{(2)}{5}$	0	0	0
$+\frac{(6)}{4}$	0	0	0	$-\frac{(15)}{21}$	$\frac{4(6)}{21}$	$\frac{(330)}{21}$
$[\langle 1^4\rangle(22)]O^{o2}_2 = \frac{(2)}{2}$	$\frac{(14)}{5}$	$\frac{(2)}{5}$	$\frac{3}{5}$	0	0	0
$+\frac{(2)}{2}$	0	0	0	$\frac{-3(2)}{7}$	$\frac{2(5)}{7}$	$\frac{-(11)}{7}$
$[\langle 2^2\rangle(10)]O^{o2}_3 = 1$	$\frac{2}{5}$	$\frac{(7)}{5}$	$-\frac{(14)}{5}$	0	0	0
$[\langle 2^2\rangle(20)]O^{o2}_4 = \frac{1(6)}{4}$	$\frac{(7)}{5}$	$-\frac{4}{5}$	$-\frac{(2)}{5}$	0	0	0
$+\frac{1(10)}{4}$	0	0	0	$-\frac{(15)}{21}$	$\frac{4(6)}{21}$	$\frac{(330)}{21}$
$[\langle 2^2\rangle(22)]O^{o2}_5 = -\frac{(2)}{2}$	$\frac{(14)}{5}$	$\frac{(2)}{5}$	$\frac{3}{5}$	0	0	0
$+\frac{(2)}{2}$	0	0	0	$-\frac{3(2)}{7}$	$\frac{2(5)}{7}$	$-\frac{(11)}{7}$
$[\langle 2^2\rangle(40)]O^{o2}_6 = 1$	0	0	0	$-\frac{2(66)}{21}$	$-\frac{(165)}{21}$	$\frac{2(3)}{21}$

On peut donc écrire :

$$O_1^{o2} = -\left(\frac{10}{4}\right) A + \left(\frac{6}{4}\right) B$$

$$O_4^{o2} = \left(\frac{6}{4}\right) A + \left(\frac{10}{4}\right) B$$

Où A et B sont respectivement les opérateurs classés dans le groupe SO_5 $\left[(11)(11)\right]$ (20) et $\left[(20)(20)\right]$ (20)

Or $O'^{o2}_1 = \sqrt{\frac{3}{8}}\, O^{o2}_1 + \sqrt{\frac{5}{8}}\, O^{o2}_4$

On trouve en remplaçant O^{o2}_1 et O^{o2}_4 par leur expression que $O'^{o2}_1 = B$

Soit $\boxed{O'^{o2}_1 = \left[(20)(20)\right] (20)2}$ opérateur classé complètement en $SO_5 \supset R_3$

De même $O^{o2}_2 = \left(\frac{2}{2}\right) C + \left(\frac{2}{2}\right) D$

$O^{o2}_5 = -\left(\frac{2}{2}\right) C + \left(\frac{2}{2}\right) D$

où C et D sont respectivement $\left[(11)(11)\right]$ (22)

$\left[(20)(20)\right]$ (22)

Donc $O'^{o2}_2 = \frac{1}{(2)}\left[-O^{o2}_2 + O^{o2}_5\right] = C$ soit

$$O'^{o2}_2 = \left[(20)(20)\right] (22)2$$

Enfin on a immédiatement

$$\boxed{O'^{o2}_3 = \left[(20)(20)\right] (40)2}$$

On trouve bien que les opérateurs $\left\{W^{ok'}\ W^{ok}\right\}^{o2}$ qui ne font pas intervenir le spin s'expriment simplement en fonction d'opérateurs classés par rapport aux propriétés orbitales, donc par rapport à $SO_5 \supset R_3$ seulement.

2°) <u>Etude des opérateurs couplés en (x,k) = (0,1) intervenant dans la correction $\Delta\rho$.</u>

Les considérations sur l'hermiticité ont montré qu'ils étaient construits à partir de $\langle 2 \times 1^2 \rangle$ et nous les avons appelés B^{o1}_i.

L'ensemble des résultats est donné par la table XI

$[\langle 2\rangle\langle 1\rangle\sigma \cup B^{01}$	$W^{(01,02)01}$	$W^{(03,02)01}$	$W^{(03,04)01}$	$W^{(12,11)01}$	$W^{(12,11)01}$	$W^{(12,13)01}$	$W^{(14,13)01}$
$(\ )\langle 2\rangle(11)B^{01}_1$	$-\frac{(42)}{14}$	$\frac{(3)}{6}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{(2)}{4}$	$\frac{(14)}{8}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{(3)}{4}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(11)B^{01}_2$	$\frac{(10)}{8}$	$-\frac{(35)}{14}$	$\frac{(105)}{28}$	$-\frac{(210)}{20}$	$\frac{(30)}{120}$	$-\frac{(105)}{210}$	$\frac{(35)}{140}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(21)B^{01}_3$	$-\frac{(5)}{10}$	$-\frac{11(70)}{140}$	$-\frac{1(210)}{28}$	0	$\frac{(15)}{30}$	$\frac{11(210)}{420}$	$\frac{1(70)}{28}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(21)B^{01}_4$	$-\frac{(15)}{10}$	$-\frac{1(210)}{140}$	$\frac{1(70)}{28}$	0	$-\frac{3(5)}{10}$	$-\frac{3(70)}{140}$	$\frac{(210)}{28}$
$(\ )\langle 31\rangle(11)B^{01}_5$	$\frac{(15)}{12}$	$-\frac{(210)}{42}$	$\frac{(70)}{28}$	$\frac{(35)}{10}$	$\frac{3(5)}{20}$	$-\frac{3(70)}{70}$	$\frac{3(210)}{140}$
$(\ )\langle 31\rangle(21)B^{01}_6$	$\frac{(15)}{30}$	$\frac{11(210)}{420}$	$\frac{(70)}{28}$	0	$\frac{3(5)}{20}$	$\frac{11(70)}{140}$	$\frac{(210)}{28}$
$(\ )\langle 31\rangle(31)B^{01}_7$	$\frac{3(5)}{10}$	$\frac{3(70)}{140}$	$-\frac{(210)}{28}$	0	$-\frac{(15)}{10}$	$-\frac{(210)}{140}$	$\frac{(70)}{28}$

Table XI

On vérifie sans peine que les opérateurs $\langle 1^2\times 2\rangle$ s'expriment en fonction des $W^{(x_1k_1\ x_2k_2)\ 01}$ avec les mêmes coefficients que les opérateurs $\langle 2\times 1^2\rangle$ en fonction des $W^{(x_2k_2,x_1k_1)\ 01}$.

C'est bien compatible avec le fait que $\sum_{i\neq j} Q_{ij}$ où Q_{ij} est symétrique est identique à $2\sum_{i<j} Q_{ij}$ entre des états antisymétriques.

Les opérateurs qui interviennent dans Δ_ℓ sont du type $W^{ok'}W^{ok}$. On peut donc les exprimer en fonction des opérateurs classés dans $SO_5 \supset R_3$ seulement.

Les tableaux de C.C.G. permettent immédiatement de trouver que :

$$W^{(01,02)01} = \left(\frac{3}{3}\right)B'^{01}_1 + \frac{(15)}{15}B'^{01}_2 - \frac{(15)}{5}B'^{01}_3$$

$$W^{(03,02)01} = -2\frac{(42)}{21}B'^{01}_1 + 11\frac{(210)}{210}B'^{01}_2 - \frac{(210)}{70}B'^{01}_3$$

$$W^{(02,04)01} = \frac{(14)}{7}B'^{01}_1 + \frac{(70)}{14}B'^{01}_2 + \frac{(70)}{14}B'^{01}_3$$

où $B'^{01}_1 \equiv [(11)(20)]\ (11)1$

$B'^{01}_2 \equiv [(11)(20)]\ (21)1$

$B'^{01}_3 \equiv [(11)(20)]\ (31)1$

3°) Etude des opérateurs couplés en (xk) = (1,2) intervenant dans Δ_{AC}

Suivant le même principe que pour (02) et (01) nous avons appelé C^{12}_i les opérateurs construits à partir de $\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle$ et pouvant intervenir dans Δ_{AC} Les résultats sont rassemblés dans la table XIII.

$(\langle 2\rangle\times\langle 1^2\rangle)_{\sigma u} C^{12}$	$W^{01,11}$	$W^{01,13}$	$W^{03,11}$	$W^{03,13}$	$W^{10,02}$	$W^{12,11}$	$W^{12,13}$	$W^{14,13}$	$W^{12,02}$	$W^{12,04}$	$W^{14,02}$	$W^{14,04}$
$(\ )\langle 2\rangle(20) C^{12}_1$	$\frac{(70)}{40}$	$-\frac{(20)}{20}$	$-\frac{(20)}{20}$	$-\frac{(20)}{40}$	$\frac{(6)}{12}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{2(21)}{21}$	$\frac{(210)}{28}$	$-\frac{(30)}{56}$	$\frac{(6)}{14}$	$\frac{(6)}{14}$	$\frac{(165)}{28}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(20) C^{12}_2$	$\frac{(70)}{40}$	$-\frac{(20)}{20}$	$\frac{(20)}{20}$	$\frac{(20)}{40}$	$-\frac{(6)}{4}$	$-\frac{3}{20}$	$\frac{2(21)}{35}$	$-\frac{3(210)}{140}$	$-\frac{(30)}{56}$	$\frac{(6)}{14}$	$\frac{(6)}{14}$	$\frac{(165)}{28}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(22) C^{12}_3$	$\frac{(14)}{10}$	$-\frac{1}{10}$	$-\frac{1}{10}$	$-\frac{3}{10}$	0	0	0	0	$-\frac{3(6)}{14}$	$\frac{(30)}{14}$	$\frac{(30)}{14}$	$-\frac{(33)}{14}$
$(\ )\langle 21^2\rangle(31) C^{12}_4$	0	0	0	0	0	$-\frac{(6)}{5}$	$-\frac{9(14)}{70}$	$-\frac{(140)}{70}$	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$(\ )\langle 21^2\rangle(10) C^{12}_5$	$\frac{2}{5}$	$\frac{(14)}{10}$	$\frac{(14)}{10}$	$-\frac{(14)}{5}$	0	0	0	0	0	0	0	0
$(\ )\langle 21^2\rangle(21) C^{12}_6$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{(5)}{5}$	$-\frac{(105)}{35}$	$-\frac{(42)}{14}$	0	0	0	0

On trouve 6 opérateurs C^{12} en fonction de 12 produits (W W). Les 6 autres viennent de $\langle 31\rangle^3$ [(20), (20)', (21), (22), (31), (40)]

Les 5 groupes $W^{10,02}$ $W^{12,02}$ $W^{12,04}$, $W^{14,02}$ $W^{14,04}$ contribuent à la correction Δ_{AC}. Ils s'expriment en fonction des quatre opérateurs $C^{12}_{1,2,3,4}$

On doit donc pouvoir obtenir une combinaison linéaire des (WW) considérés, qui soit nulle pour toute configuration d^N. C'est la combinaison orthogonale aux quatre autres. On trouve que l'opérateur X :

$$\frac{2}{21}(66)\ W^{(12,02)12} + \frac{(330)}{42} W^{(14,02)12} + \frac{(330)}{42} W^{(12,04)12} - \frac{2(3)}{21} W^{(14,04)12}$$

doit avoir des éléments de matrice nuls entre deux états quelconques d'une configuration d^N

Les 6 autres opérateurs sont du type $\langle 31\rangle$ sont donnés par

$[\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle]\tau_{12}C^{12}$	$W^{01,11}$	$W^{01,13}$	$W^{03,11}$	$W^{03,13}$	W^{1302}	$W^{12,11}$	$W^{12,13}$	$W^{14,13}$	$W^{12,02}$	$W^{12,04}$	$W^{14,02}$	$W^{14,04}$
$[\ ]\langle 31\rangle^3(20)C_7^{12}$	$\frac{3(2)}{10}$	$-\frac{6(7)}{35}$	$-\frac{6(7)}{35}$	$-\frac{3(7)}{35}$	0	0	0	0	$\frac{5(42)}{294}$	$-\frac{2(210)}{147}$	$-\frac{2(210)}{147}$	$-\frac{5(231)}{147}$
$[\ ]\langle 31\rangle^3(20)'C_8^{12}$	$\frac{(5)}{20}$	$-\frac{(70)}{70}$	$\frac{(70)}{70}$	$-\frac{(70)}{140}$	$\frac{(21)}{6}$	$-\frac{(14)}{20}$	$\frac{2(6)}{15}$	$-\frac{(15)}{10}$	$-\frac{(105)}{196}$	$\frac{(21)}{49}$	$\frac{(21)}{49}$	$\frac{(2310)}{196}$
$[\ ]\langle 31\rangle^3(21)C_9^{12}$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$-\frac{(5)}{5}$	$\frac{(105)}{35}$	$\frac{(42)}{14}$	0	0	0	0
$[\ ]\langle 31\rangle^3(22)C_{10}^{12}$	$\frac{(42)}{10}$	$\frac{(3)}{10}$	$\frac{(3)}{10}$	$\frac{3(3)}{10}$	0	0	0	0	$-\frac{3(2)}{14}$	$\frac{(10)}{14}$	$\frac{(10)}{14}$	$-\frac{(11)}{14}$
$[\ ]\langle 31\rangle^3(31)C_{11}^{12}$	0	0	0	0	0	$\frac{(6)}{5}$	$\frac{9(14)}{70}$	$\frac{(35)}{35}$	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
$[\ ]\langle 31\rangle^3(40)C_{12}^{12}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$-\frac{2(66)}{21}$	$-\frac{1(330)}{42}$	$-\frac{1(330)}{42}$	$\frac{2(3)}{21}$

On voit que l'opérateur $\langle 31\rangle^3$ (40) C_{12}^{12} est l'opérateur X trouvé plus haut. De même, les 5 autres opérateurs $\langle 31\rangle$ sont représentés par des combinaisons linéaires $\sum \alpha_i (W^{x_1 k_1} W^{x_2 k_2})_i^{12}$ qui ont des éléments de matrice nuls entre deux états quelconques d'une configuration d^n.

B) Etude des corrections Δ

Les opérateurs classés ainsi déterminés permettent d'exprimer soit les corrections $\Delta = \dfrac{\langle d^n\psi \| X^{xk} \| d^n\psi\rangle}{\langle d^n\psi \| W^{xk} \| d^n\psi'\rangle}$ soit les opérateurs X^{xk} eux-même.

A titre d'exemple cherchons l'expression de Δ_ℓ en fonction des opérateurs classés

$$\Delta_\ell = \sqrt{2} \sum_{t k'} v_t \sqrt{\frac{[k']}{[t]}} \begin{Bmatrix} t & k' & 1 \\ 2 & \ell' & 2 \end{Bmatrix} \left[1 - (-1)^{k'}\right] \frac{\langle d^n\psi \| \sum_{i<j} (W_i^{ok'} W_j^{ot})^{c1} \| d^n\psi'\rangle}{\langle d^n\psi \| W^{01} \| d^n\psi'\rangle}$$

et considérons le cas d'une excitation $d^n \rightarrow d^{n-1}\, d'$

$$\Delta_\ell = \frac{\langle d^n \psi \| X^{o1} \| d^n \psi' \rangle}{\langle d^n \psi \| W^{o1} \| d^n \psi' \rangle}$$

On trouve pour X^{o1} l'expression

$$X^{o1} = 2\sqrt{2}\, v_2 \left[\frac{\sqrt{35}}{50} \sum (W_i^{o1} W_j^{o2}) - \frac{\sqrt{10}}{25} \sum (W_i^{o3} W_j^{o2})^{o1} \right] + 2\sqrt{2}\, v_4 \left[\frac{\sqrt{30}}{90} \sum (W_i^{o3} W_j^{o4})^{o1} \right]$$

et en fonction des paramètres $b = \frac{1}{70} v_2 - \frac{1}{126} v_4$ et $c = \frac{1}{18} v_4$ on obtient

$$X^{o1} = 70b \left\{ \frac{\sqrt{70}}{25} \sum (W_i^{o1} W_j^{o2})^{o1} - \frac{4\sqrt{5}}{25} \sum (W_i^{o3} W_j^{o2})^{o1} \right\}$$
$$+ c \left\{ \frac{2\sqrt{70}}{5} \sum (W_i^{o1} W_j^{o2})^{o1} - \frac{8\sqrt{5}}{5} \sum (W_i^{o3} W_j^{o2})^{o1} + \frac{4\sqrt{15}}{5} \sum (W_i^{o3} W_j^{o4})^{o1} \right\}$$

En remplaçant les opérateurs $(W^{ok'} W^{ok})$ par leur développement en fonction des opérateurs B'^{o1} classés par rapport à $SO_5 \supset R_3$, X^{o1} s'écrit :

$$\boxed{\begin{aligned} X^{o1} &= 2\sqrt{42}\, b \left[15\sqrt{5}\, B'^{o1}_1 - (B'^{o1}_2 + B'^{o1}_3) \right] \\ &\quad + 2\sqrt{42}\, c \sqrt{5}\, B'^{o1}_1 \end{aligned}}$$

X^{o1} dépend donc des 2 groupes d'opérateurs a) $B'^{o1}_1 = \left[(11)(20)\right]\ (11)\ 1$

b) $B'^{o1}_2 + B'^{o1}_3 = \left[(11)(20)\right]\ (21)1 + \left[(11)(20)\right]\ (31)\ 1$

On remarque que le coefficient de C ne dépend que de $\left[(11)(20)\right]\ (11)\ 1$

Or $\Delta_\ell = \frac{\langle \| X^{o1} \| \rangle}{\langle \| W^{o1} \| \rangle}$ et $W^{o1} = (11)1$

On montre ainsi que le coefficient du paramètre C est constant pour une configuration d^n donnée, résultat en accord avec l'étude de Cl. Bauche.

<u>Cas particulier de l'excitation $d^2 \rightarrow dd'$</u>

On montre facilement que les expressions $\Delta_\ell, \Delta_q, \Delta_{sc}$ s'écrivent dans ce cas

$$\Delta_\ell = 2 \sum_{t\,pair} v_t (-1)^{L+1} \begin{Bmatrix} L & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix}$$

$$\Delta_q = (-1)^{L+1} \sum_t v_t \left[\begin{Bmatrix} L' & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix} + (-1)^{L+L'} \begin{Bmatrix} L & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix} \right]$$

$$\Delta_{sc} = (-1)^{L+1} \sum_t v_t \left[\begin{Bmatrix} L' & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix} + (-1)^{L+L'} \begin{Bmatrix} L & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix} \right]$$

On remarque que $\Delta_q = \Delta_{sc}$ pour tout ensemble Ψ, Ψ' de d^2. Les termes diagonaux s'écrivent simplement

$$\Delta_q = (-1)^{L+1} \sum_t v_t \, 2 \begin{Bmatrix} L & 2 & 2 \\ t & 2 & 2 \end{Bmatrix}$$

et dans ce cas on a $\Delta_q = \Delta_{sc} = \Delta \ell$

On en déduit en particulier que $\Delta_\ell - \Delta_{sc} = 0$ pour tous les termes de d^2

De façon évidente $\Delta_\ell - \Delta_{sc} = 0$ pour le terme ^2D de d

Ainsi la valeur $[\Delta_\ell - \Delta_{sc}]$ est la même pour les configurations d et d^2.

La symérie par rapport à la 1/2 couche entraîne qu'il en sera de même pour l'ensemble d^8 - d^9.

Pour les termes de spin maximal la symétrie par rapport au 1/4 de couche permet d'en déduire que $[\Delta_\ell - \Delta_{sc}]$ a la même valeur pour les termes de Hund des configurations d^3 et d^4 d'une part et d^6, d^7 d'autre part.

<u>Cas général d'une excitation $1^n \rightarrow 1^{n-1}\ 1'$</u>

Les corrections Δ^{xk} s'écrivent

$$\Delta^{xk} = -\sqrt{2} \sum_{t k'} v_t \sqrt{\frac{[k']}{[t]}} \begin{Bmatrix} t & k' & k \\ \ell & \ell' & \ell \end{Bmatrix} \left[(-1)^k + (-1)^{k'} \right] \frac{\langle \ell^n \psi \| \sum_{i \neq j} (w_i^{xk'} w_j^{ct})^{xk} \| \ell^n \psi' \rangle}{\langle \ell^n \psi \| W^{xk} \| \ell^n \psi' \rangle}$$

et pour le cas général considéré ici on ne connait pas la classification des opérateurs biélectroniques.

En développant l'expression ci-dessus on peut montrer que Δ^{xk} s'écrit

$$\Delta^{xk} = -2\sqrt{2}\, n \sum_{tk'} v_t \sqrt{[k']}\left[(-1)^k + (-1)^{k'}\right] \begin{Bmatrix} t & k' & k \\ \ell & \ell' & \ell \end{Bmatrix} \sum_{\bar\Psi \bar\Psi'} \langle \bar\Psi | \} \Psi \rangle \langle \bar\Psi' | \} \Psi \rangle (-1)^{2S+S'+\bar S+\frac12+x+k}$$

$$\sqrt{[x][k]}\,\{[S][S'][L][L']\}^{\frac12} \begin{Bmatrix} \ell & \ell & t \\ L' & L & k' \\ L' & L & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar S' & \bar S & x \\ S & S' & \frac12 \end{Bmatrix} \frac{\langle \ell^{n-1} \bar\Psi \| W^{xk'} \| \ell^{n-1} \bar\Psi' \rangle}{\langle \ell^n \Psi \| W^{xk} \| \ell^n \Psi' \rangle}$$

En exprimant les coefficients de parenté fractionnelle sous leur forme factorisée en produit d'un CGG $SO_{2\ell+1} \supset R_3 : \langle u_1 L_1 + u_2 L_2 \,|\, U\, L \rangle$ et d'un coefficient $\langle v_1 S_1 | \} v S \rangle$ où v est la séniorité, on réussit à montrer que les parties dépendant du spin au numérateur et au dénominateur, c'est-à-dire pour X^{xk} et W^{xk}, sont les mêmes.

On trouve que cette partie s'écrit, avec les notations usuelles $\bar\Psi$ et $\bar{\bar\Psi}$ pour les termes parents et grand-parents :

$$\sum_{\bar v \bar S \bar S'} \langle \bar v \bar S | v S \rangle \langle \bar v \bar S' | v S' \rangle (-1)^{2S+S'+\bar S+\frac12+x} [x]^{\frac12} \begin{Bmatrix} \bar S' & \bar S & x \\ S & S' & \frac12 \end{Bmatrix}$$

$$\times \sum_{\bar{\bar v} \bar{\bar S} \bar{\bar S}'} \langle \bar{\bar v} \bar{\bar S} | \bar v \bar S \rangle \langle \bar{\bar v} \bar{\bar S}' | \bar v \bar S' \rangle \left([\bar S][\bar S']\right)^{\frac12} (-1)^{\bar S+\frac12+\bar S+x} \begin{Bmatrix} \bar S & x & \bar S' \\ \frac12 & \bar S & \frac12 \end{Bmatrix}$$

Dans Δ^{xk} cette expression s'en va donc et il ne reste que la dépendance en partie d'orbite à savoir :

$$\Delta^{xk} = -2n \sum_{tk'} v_t \sqrt{[k']}\left[(-1)^k + (-1)^{k'}\right] \begin{Bmatrix} t & k' & k \\ \ell & \ell' & \ell \end{Bmatrix} \sqrt{[L][L']} \sum_{\bar u \bar L \bar u' \bar L'} \langle \bar u \bar L + \ell | u L \rangle \langle \bar u' \bar L' + \ell | u' L' \rangle (-1)^k \sqrt{[k]}$$

$$\times \begin{Bmatrix} \ell & \ell & t \\ L' & L & k' \\ L' & L & k \end{Bmatrix} \frac{\langle \ell^{n-1} \bar\Psi \| V^{k'} \| \ell^{n-1} \bar\Psi' \rangle}{\langle \ell^n \Psi \| V^k \| \ell^n \Psi' \rangle}$$

et on arrive aux conclusions suivantes :

Si on utilise la description des effets de second ordre sur la structure hyperfine à l'aide des corrections Δ (description qui n'a de sens, comme l'explique Cl. Bauche, que pour les configurations ℓ^n, la classification des opérateurs suivant les groupes $SO_{2\ell+1} \supset R_3$ est suffisante, Δ ne dépend que des propriétés orbitales.

PLAN DU CHAPITRE IV.

CALCULS AUTOMATIQUES

1ère partie : Description de CLEGA1, programme de calcul des formules angulaires.

Introduction.

I) Notion sur la compilation algol des ordres arithmétiques.

A) Production de la notation post-fixée.

1°) Notation préfixée et postfixée.

2°) Passage de la notation habituelle à la notation post-fixée. Pile de mémoires.

a) Expression complètement parenthésée.

b) Expression non complètement parenthésée.

B) Constitution du programme objet.

II) Adaptation au cas du calcul d'une suite d'ordres arithmétiques sur des variables par un programme écrit en langage symbolique.

III) Programmation d'une formule littérale angulaire quelconque.

1°) Position du problème. Principe du codage.

2°) Détermination des séquences.

a) Construction des listes initiales.

b) Construction de la suite d'ordres exécutables.

3°) Décodage et rangement des renseignements concernant chaque

$P_i = \Sigma_i \pi_i$.

a) Rangement des renseignements sur chaque Σ dans BAV(k)

b) Rangement des renseignements concernant chaque π_i dans BAG(i) .

4°) Exécution de la formule - Simulation de la récursivité croisée.

IV) Organisation générale du programme CLEGA1 .

1°) Introduction.

2°) Forme des données.

3°) Organigramme général de l'organisation des calculs.

4°) Décodage.

5°) Avancement des variables.

2ème partie : Résolution des systèmes linéaires sous forme exacte : CLEGA2 .

I) Introduction.

II) Principe général de la méthode de résolution choisie :

1°) Mise en évidence des équations proportionnelles par triangularisation.

2°) Résolution des systèmes : Principe général.

3°) Résolution sous forme exacte - Rationnalisation des systèmes.

a) Rationnalisation par rapport à la dernière colonne.

b) Résolution des cas non dégénérés.

c) Résolution des cas dégénérés.

4°) Calculs sous forme exacte par un bloc d'"algèbre Rotenberg" double précision entière.

a) Représentation des nombres en machine.

b) Les nombres "Rotenberg"

Un exemple : L'extraction des racines carrées entières par la méthode des nombres impairs.

III) Ecriture du programme CLEGA2 .

1°) Description générale.

2°) Organigramme du programme principal et du sous-programme MULPLE qui traite la résolution des cas dégénérés.

3°) Description du sous-programme COUPE qui sépare chaque système en sous-systèmes indépendants.

IV) Conclusion de la 2ème Partie.

Annexe.

- Liste des sous-programmes du bloc de résolution.

A) S. P. principaux.

B) Petits sous-programmes annexes.

- Liste des sous-programmes du bloc d'algèbre Rotenberg D. P. entière.

CHAPITRE IV : CALCULS AUTOMATIQUES

On sait que la méthode utilisée pour le calcul des CCG conduit à la résolution de systèmes linéaires $\Sigma_{ij}\ a_{ij}^{k}\ x_j = o$ où les inconnues x_j sont les CCG cherchés et où les coefficients a_{ij}^{k} sont donnés par des formules angulaires très générales. La première étape est la construction des systèmes, c'est à dire le calcul de la formule angulaire donnant les a_{ij}^{k} pour les jeux de variables utiles et le rangement sous une forme matricielle facilitant la deuxième étape de la détermination des CCG, c'est à dire la résolution des systèmes.

1ère partie : Description de CLEGA1, programme de calcul des formules angulaires.

Notre ancien programme AGENAC écrit en collaboration avec Y. Bordanier et J. Bauche et avec l'aide du professeur Racah et de son équipe de Jerusalem vers les années 1965, n'est pas assez général pour traiter les différents types de formules angulaires pouvant apparaître dans les calculs des coefficients de Clebsch Gordan (C.C.G.). En effet, il est conçu et adapté au calcul des matrices des coefficients angulaires des opérateurs standard sous forme exacte et admet deux types de formules (couvrant déjà un grand nombre de cas)

$$X_0 = \pi_0(\Sigma_1\pi_1+\Sigma_2\pi_2+\ldots+\Sigma_5\pi_5) \qquad (1)$$

et

$$X_0 = \Sigma_1\pi_1[\Sigma_2\pi_2[\Sigma_3\pi_3[\Sigma_4\pi_4[\Sigma_5\pi_5]]]] \qquad (2)$$

où les sommes Σ_i ont lieu sur une à quatre listes de variables et où les π_i sont des produits de fonctions angulaires du genre

$$\pi_i = (-1)^{S_1+S_2+S}\,[S][L]\left([S_1][S_2]\right)^{1/2}\begin{Bmatrix} S & L & J \\ L' & S' & 1 \end{Bmatrix} \ldots \text{ TABLE } \ldots$$

la forme (1) signifie qu'on peut faire calculer par Agenac une somme de 5 quantités $\Sigma_i \pi_i$ au maximum et la forme (2) signifie qu'on peut faire calculer 5 sommes imbriquées au maximum

$\Sigma_x \pi_1(x) \Sigma_y \pi_2(x,y) \ldots$.

En réalité, lorsqu'une formule n'est ni du type (1) ni du type (2), mais est assez proche de l'un d'eux, elle est souvent calculable sans trop de difficultés par Agenac qui est un programme assez souple d'utilisation, grâce à la possibilité d'influer sur le déroulement standard de l'exécution par l'intermédiaire du sous-programme SPCODE et par le jeu de tabulations successives de résultats partiels.

Cependant, pour notre problème, les types de formules à traiter étaient trop éloignés des deux types standard et il était nécessaire de revoir complètement la programmation des formules angulaires. Notre but était donc de réaliser un programme qui permette le calcul des CCG d'un groupe semi-simple quelconque et plus généralement le calcul de toute matrice angulaire. Plusieurs difficultés étaient à résoudre :

1) Ne pas être limité dans le type de formule. Nous verrons comment CLEGA1 construit lui-même à la lecture de la formule donnée sur carte, la suite d'ordres exécutables.

2) Le nombre limité à 5 de quantités $\Sigma_i \pi_i$ dans Agenac est imposé par le mode de rangement des données de chaque π_i en mémoire. Nous verrons qu'un mode de rangement séquentiel associé à des tables d'adresses, permet de n'utiliser que la place nécessaire.

3) Les différentes listes de variables comprises par Agenac sont insuffisantes pour les systèmes de CCG et nous avons défini un certain nombre de types de listes supplémentaires, telles que

- des listes alphanumériques de représentations
- des listes de réductions de représentations
- des listes de produits de Kronecker

et de même que dans Agenac (et dans CLEGA1) on peut demander au programme la construction de certaines listes résultantes (Ex: $f^6 + d = f^6 d$) permettant, à l'exécution, la recherche des différents parents d'un terme donné, on a ajouté un autre mode de construction déterminant une liste de représentations qui prépare l'avancement des variables à l'exécution.

Nous ne pouvons pas décrire en détail le programme CLEGA1 dans son ensemble qui comprend plus de 4500 ordres Fortran. Nous nous sommes surtout attachés à décrire la partie dont la conception diffère totalement d'Agenac et qui en augmente la puissance et la généralité, c'est à dire celle qui permet de donner à calculer une formule d'un type quelconque. La description du programme Agenac est donnée dans notre thèse de 3ème cycle (A. CARLIER 1967); rappelons seulement qu'il calcule les formules sous forme exacte grâce à un bloc d'algèbre Rotenberg comprenant, d'une part, les

opérations élémentaires d'addition, multiplication, division puissance, de nombres Rotenberg, c'est à dire de nombres représentés par leur décomposition en puissances sur les 11 premiers nombres premiers et d'une partie entière non décomposable; d'autre part, les fonctions angulaires du type 3_j, 6_j, 9_j, ...; grâce au bloc d'avancement des variables les calculs et les résultats s'organisent sous forme de matrices adaptées au traitement ultérieur (diagonalisation).

Le bloc d'algèbre Rotenberg de CLEGA1 est le même que celui d'Agenac et le bloc d'avancement des variables n'est pas d'une conception très différente. Nous renvoyons donc à leur description donnée dans la thèse de 3ème cycle.

Dans le prochain paragraphe, nous rappelons certains principes utilisés par les compileurs algol pour construire les séquences d'ordres exécutables correspondant à une suite d'ordres symboliques arithmétiques ; le deuxième paragraphe montre comment nous avons adapté la méthode au calcul notamment des valeurs propres des opérateurs de Casimir et le troisième paragraphe décrit la programmation d'une formule littérale quelconque, programmation qui fait appel d'une part à la méthode précédente de la compilation algol et qui comprend, d'autre part, un sous-programme d'exécution simulant une récursivité croisée entre deux procédures pouvant s'appeler mutuellement. Enfin, dans le dernier paragraphe, nous donnons un aperçu de l'organisation générale du programme.

I) Notion sur la compilation algol des ordres arithmétiques

Dans leur manuel d'Algol, Bolliet, Gastinel et Laurent (1964) consacrent une annexe aux techniques utilisées par les compileurs Algol pour fabriquer, à partir d'un programme écrit en langage symbolique, le programme objet en langage exécutable par la machine. Le principe de la compilation Algol nous a donné l'idée d'essayer d'imiter ce procédé pour faire construire par le programme Fortran lui-même, d'après la lecture de la formule littérale, la suite d'ordres représentant le calcul de la formule puis de les faire exécuter pour tous les jeux de variables utiles.

Rappelons d'abord la méthode de la compilation Algol d'une suite d'opérations sur des variables.

A) Production de la notation post-fixée - 1ère étape

1°) Notation préfixée et postfixée (ou notation polonaise)

C'est la notation fonctionnelle utilisée couramment en mathématique formelle. Une opération sur deux variables A et B peut s'écrire F(A,B) ou FAB; par exemple (A+B) s'écrit +(A,B) ou +AB. L'intérêt de cette notation pour l'analyse des formules parenthésées a été mis en évidence par un logicien polonais. Aussi on l'appelle parfois "notation polonaise". La lecture des ordres d'un programme se fait de gauche à droite et Algol utilise en fait la notation post-fixée, ou notation polonaise inverse, qui place le signe d'opération à droite des deux opérandes correspondants; par exemple

(A + B) s'écrit (A, B) + soit AB+

A + (B x (C-D)) s'écrit (A, (B, (C, D) -) x) + soit ABCD - x +

Ainsi, la notation post-fixée permet d'écrire des expressions sans parenthèse en faisant apparaître les opérations dans l'ordre normal d'exécution et on comprend l'intérêt qu'elle présente pour fabriquer le programme résultant. L'exemple précédent donne:

opération 1 - C-D⇒R1

2 x B x R1⇒R2

3 + A + R2

2°) Passage de la notation habituelle à la notation post-fixée. Notion de piles de mémoires

a) Expressions complètement parenthésées

Il s'agit d'expressions où il existe une paire de parenthèses pour chaque opération.

Exemple: (((A+B) - C) / (((D x (E+F)) / G) - H) + J)) (1)

En notation post-fixée, cette espression devient

AB + C - DEF + x G/H - J + / (2) et la suite des opérations est, sans ambiguité,

1 A+B

2 (A+B) - C

3 (E+F)

4 D x (E+F)

5 (D x (E+F))/G

6 ((D x (E+F))/G) - H

7 (((D x (E+F))/G) - H) + J

8 (((A+B) - C/(((D x (E+F))/G) - H) + J))

Ainsi, la notation post-fixée supprime les parenthèses,

change l'ordre de succession des opérateurs,

conserve l'ordre des opérandes.

Avant de montrer comment on passe facilement de la notation (1) à la notation (2), définissons ce qu'on appelle une pile de mémoires.

On appelle pile un ensemble de k mémoires consécutives m_1, m_2, ... m_k dont la dernière seulement est accessible grâce à un index k, qui définit la hauteur de la pile. Le dernier élément de la pile s'appelle le sommet. On utilise cette technique de piles de mémoires chaque fois que l'on doit mettre temporairement en réserve des éléments d'information que l'on trouve dans un certain ordre et qui seront utilisés par la suite dans l'ordre inverse.

Algorithme de passage à la notation post-fixée

Il est représenté par l'organigramme 1.

S(i) est la chaîne de départ en notation ordinaire, c'est à dire la succession d'opérandes d'opérateurs et de parenthèses correspondant à l'expression (1).

P(k) est la chaîne post-fixée cherchée correspondant à l'expression (2).

On balaie l'expression (1) de gauche à droite, soit S(i) de i = 1 à n.

Une parenthèse qui s'ouvre est ignorée.

Un opérande est recopié dans la liste résultante P(k).

Un opérateur est ajouté dans une pile E de hauteur j et de sommet E_j.

Une parenthèse qui se ferme provoque le transfert du sommet, donc du dernier opérateur trouvé, à la suite des éléments P(k).
La 1ère étape de la compilation d'une suite d'opérations parenthésée est terminée.

b) Expressions non complètement parenthésées

L'expression A + B x C a deux significations possibles :

- (A+B) x C
- (A + (BxC))

L'ambiguité est levée si on affecte un poids aux opérateurs qui joue le rôle de parenthèses implicites. Ainsi, si on décide "poids (x) > poids (+)", l'expression signifie (A + (BxC)).
On définit l'ordre de priorité suivant, en nous limitant aux signes qui nous intéressent:

puissance	**	poids 4
multiplication, division	*, /	3
addition, soustraction	+, -	2
parenthèse qui se ferme	)	1
parenthèse qui s'ouvre	(	0

On peut donc, dans l'écriture symbolique, omettre un grand nombre de parenthèses.

B) Constitution du programme objet - 2ème étape

Un autre intérêt de la notation post-fixée réside dans l'optimation automatique du nombre de mémoires nécessaires au rangement des résultats intermédiaires apparaissant pendant l'évaluation d'une expression.

Considérons l'expression A * B + (C+D) * (E-F) / (G+H) + K
qui devient en notation post-fixée AB * CD + EF - * GH + / + K +
et supposons qu'une opération s'écrive à l'aide de trois adresses sous la forme

Code opération - Adresse 1 - Adr. 2 - Adr. 3 signifiant "faire agir l'opérateur sur le contenu des adresses 1 et 2 et mettre le résultat à l'adresse 3 ".

L'expression ci-dessus peut s'écrire alors :

```
*  A, B, M1
+  C, D, M2
-  E, F, M3
*  M2, M3, M2
+  G, H, M3
/  M2, M3, M2
+  M1, M2, M1
+  M1, K, M1
```

- 3 mémoires de manoeuvre seulement sont nécessaires en plus des mémoires réservées aux variables.
- En effet, si on rencontre une opération sur 2 variables, on crée une mémoire pour le résultat.
- Si on rencontre une opération sur une variable et une mémoire de manoeuvre, on met le résultat dans la mémoire déjà créée.
- Si on rencontre une opération sur 2 mémoires de manoeuvre, on met le résultat dans la première et on libère la seconde.

L'organigramme (2) réalise à la fois le passage de la notation habituelle à la notation post-fixée et la construction des ordres arithmétiques trouvés.

Soit E1 à la suite de mots initiale de type (1) non complètement parenthésée et E1(I) la prochaine unité syntaxique à analyser.

Soit E2 la pile d'opérateurs, E2(J) représentant la dernière mémoire occupée (sommet de la pile).

Soit E3 la pile d'opérandes, E3(K) représentant la première mémoire libre.

p(A) est le poids de l'opérateur A.

On balaie E1(I) de gauche à droite, c'est à dire de 1 à n

- Si on rencontre un opérateur, on l'inscrit dans la pile E2. On passe à l'unité suivante.

- Si on rencontre un opérande, on le range dans E3.

- On regarde si la priorité, c'est à dire le poids de l'opérateur placé au sommet de la pile E2, est plus grande que celle de l'opérateur qui suit l'opérande dans E1.

Si c'est non, on passe à l'unité suivante.

Si c'est oui, on construit l'opération correspondant à l'opérateur situé au sommet de E2 et portant sur les deux derniers éléments de E3 (qui est une pile). Pour l'adresse du résultat, trois cas sont à distinguer.

a) Si les opérandes sont des variables, on crée une nouvelle mémoire de manoeuvre.

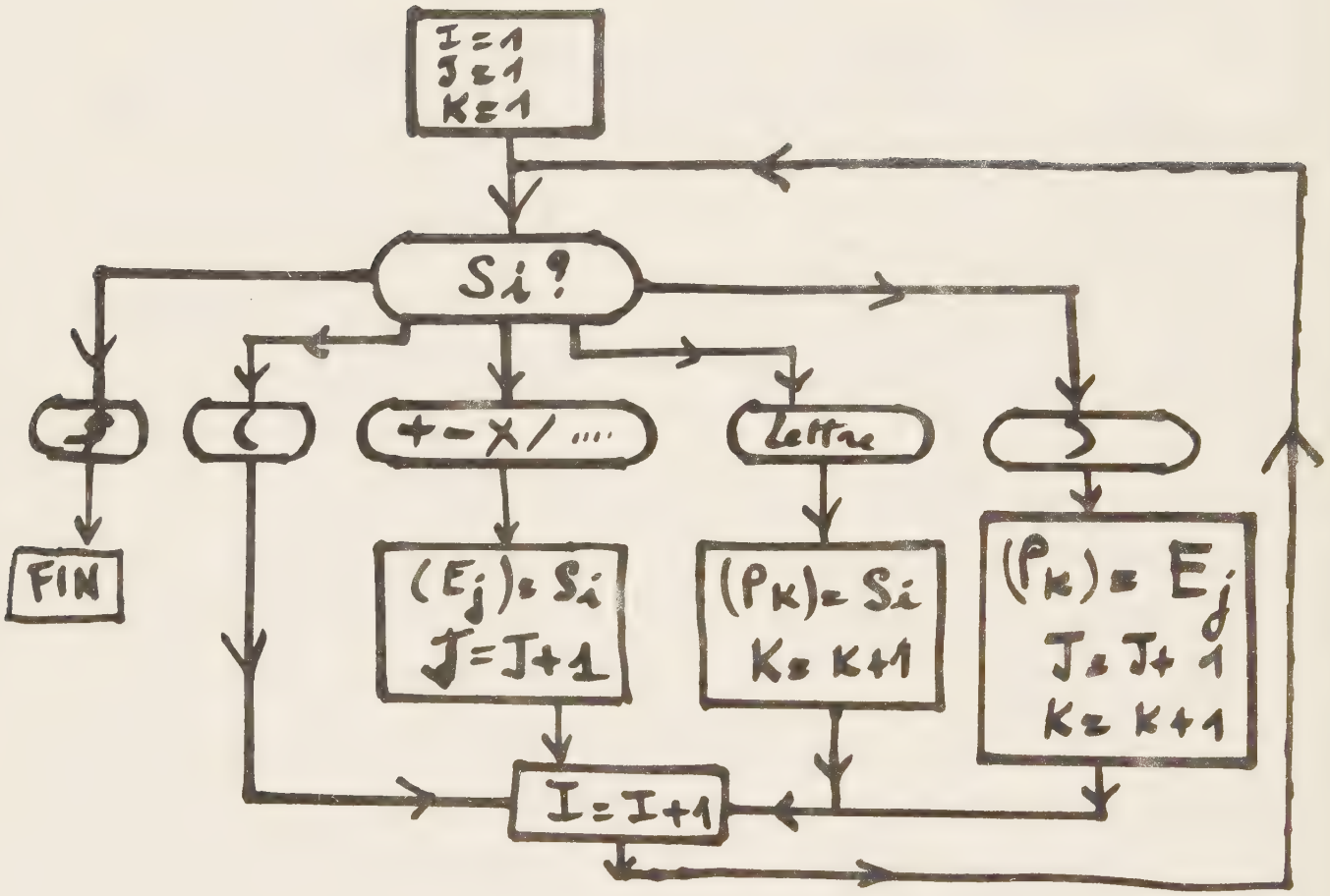
b) Si l'un des deux opérandes est contenu dans une mémoire de manoeuvre, le résultat est placé dans cette mémoire.

c) Si les deux opérandes sont contenus dans des mémoires de manoeuvre, le résultat utilise une mémoire et efface la dernière.

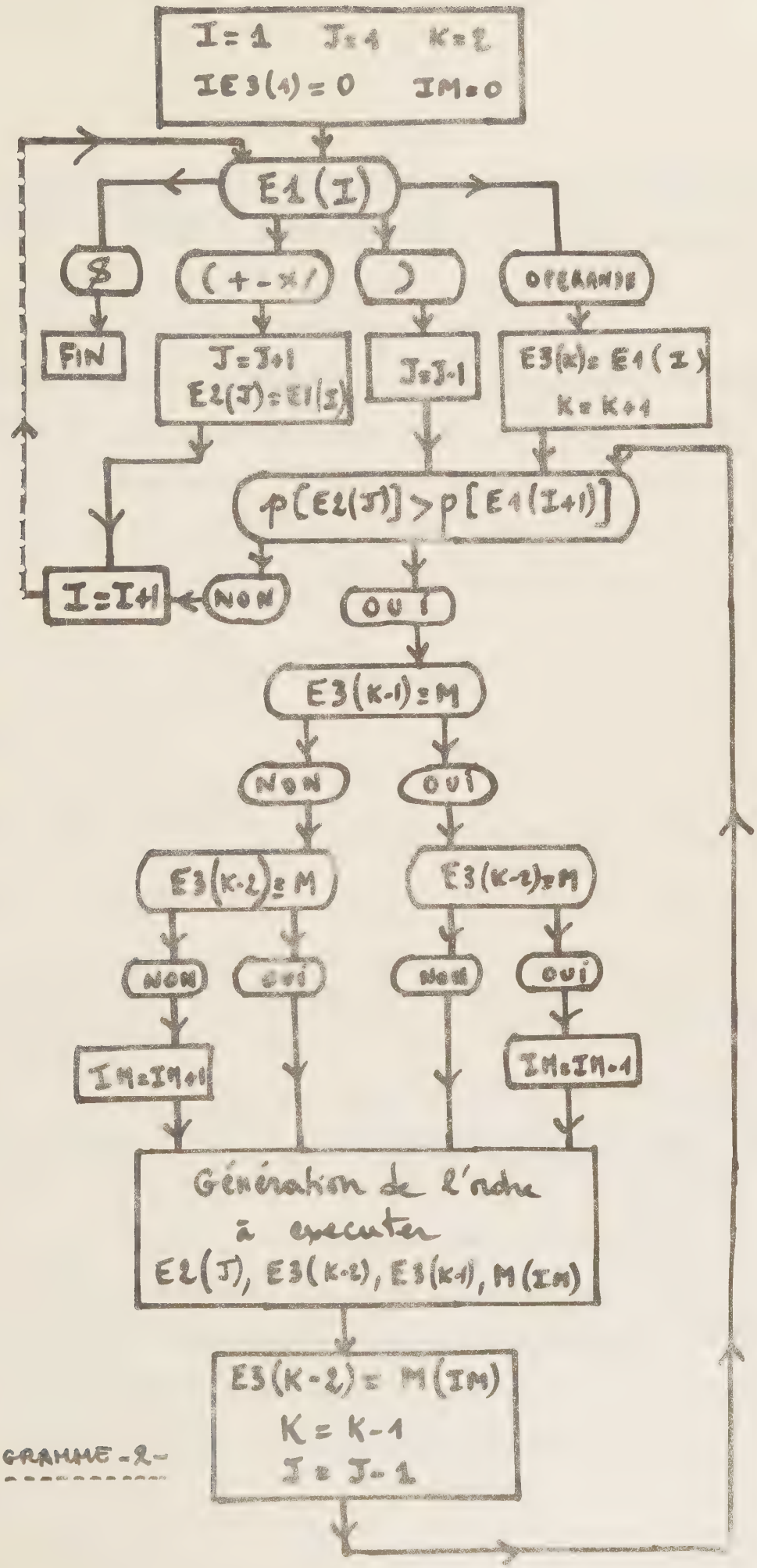
On efface un élément dans E2 et E3 et on recommence le test des priorités

- si on rencontre ") " on vérifie que l'opérateur situé au sommet de E2 est " (", on efface un élément de E2 et on fait le test des priorités.

On continue ainsi jusqu'à ce qu'on rencontre le signe spécial de fin de liste 1: " $\not{g}$ ".



ORGANIGRAMME - 1 -



ORGANIGRAMME -2-

II) Adaptation au cas du calcul d'une suite d'ordres arithmétique sur des variables par un programme écrit en langage symbolique

Dans les formules angulaires peuvent apparaître des fonctions arithmétiques simples. C'est le cas, par exemple, des valeurs propres des opérateurs de Casimir. Ainsi, dans le chapitre III, les coefficients des systèmes linéaires donnant les C.C.G. $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$, s'expriment par une formule assez compliquée comprenant en particulier une fonction, que nous avons notée F, simple mais longue et qui s'écrit

$$F = \Big[8G(\sigma) - 8G(\sigma_A) - 8G(\sigma_B) - \frac{3}{2}G(u) + \frac{3}{2}G(u_A) + \frac{3}{2}G(u_B) - \frac{2}{5}S(S+1) + \frac{2}{5}S_A(S_A+1) + \frac{2}{5}S_B(S_B+1)\Big]$$

où les $G(\sigma) \equiv G(\sigma_1 \ldots \sigma_5) = \frac{1}{16}[\sigma_1(\sigma_1+10) + \sigma_2(\sigma_2+8) + \ldots + \sigma_5(\sigma_5+2)]$

et les $G(u) \equiv G(u_1u_2) = \frac{1}{6}\Big[u_1(u_1+3) + u_2(u_2+1)\Big]$.

C'est une suite d'ordres arithmétiques ordinaire sur des variables entières ou ½ entières, mais qui dépend du problème traité et dont on ne peut pas prévoir une forme générale.

Avant d'entreprendre la programmation de la formule angulaire complète et générale, nous avons voulu éprouver la méthode sur ce problème beaucoup plus simple et voir comment on peut adapter le principe de la méthode du compileur Algol au cas d'un programme écrit en langage symbolique (Fortran), capable de définir lui-même la suite d'ordres représentant le calcul d'une fonction telle que F et à la faire exécuter ensuite pour les différents jeux de variables utiles.

Considérons l'expression (qui forme la carte "donnée")

CASIMIR NOM F(X,Y,Z) = X*(X+2) + Y*(Y-3) + ... ∅

Au décodage, trois sortes d'éléments sont à reconnaître:

. Les arguments qui sont de deux sortes

1) des variables X, Y, ...

2) des nombres 2, 3, ...

. Les signes opératoires

3) (+ - /) etc. ..... ∅

On va supposer ici

a) que les nombres sont < 50

b) que les opérations peuvent se faire en nombres entiers (pas de nombres Rotenberg)

Une première exigence est d'une part que les nombres et les variables soient traités de la même façon en tant qu'arguments, mais cependant différenciés.

Pour distinguer les variables X, Y, Z, des nombres 1, 2 .... 50 on leur associe un numéro supérieur à 50 à l'aide d'une fonction "NUMVAR"

J = NUMVAR ('X') = 51

K = NUMVAR ('Y') = 52

Ce numéro est l'adresse dans un tableau JV où sera rangée la valeur de cette variable JV(51) = valeur de X

Et dans les 50 premières mémoires du tableau JV, on range les nombres de 1 à 50, soit:

JV(2) = 2

On associe de même aux mémoires intermédiaires qui seront créées un numéro à la suite des numéros des variables et leur contenu sera rangé dans JV :

JV( )	1	2	3	....	50	51	52	53	54	55	56	.....
	1	2	3	.....	50	X	Y	Z	M1	M2	M3	.....

D'autre part, on range les signes opératoires dans un tableau OPER1(I),I = 1,9 et leur poids dans POID1(I),I = 1,9

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
OPER1(1)(2) ... (9)	'.'	'*'	'/'	'+'	'-'	')'	'('	' '	'$'
POID1(1)(2) ... (9)	4	3	3	2	2	1	0	0	0

Le type d'une opération, par exemple l'addition, est repéré au décodage par son nom alphanumérique '+' puis ensuite par son numéro i = 4 qui est son adresse dans le tableau OPER1.

Dans ces conditions, une opération à réaliser est complètement caractérisée par la donnée de 4 nombres:

Le n° de l'opération, l'adresse dans le tableau JV du 1er opérande, l'adresse dans JV du 2ème opérande, l'adresse dans JV où l'on doit ranger le résultat.

Par exemple, l'ensemble 4, 51, 2, 54 est la forme codée représentant l'expression

$$JV(54) = JV(51) + JV(2)$$

L'organigramme (3) lit la carte donnée CASIMIR .... et range la suite de mots trouvés en les codant; cette suite est équivalente à la liste 1 initiale du paragraphe précédent.

Dans JE1(i) on repère le type de la ième unité syntaxique rencontrée

- Si c'est un argument numérique (nombre) ou alphanumérique (variable x, ...) } JE1(i) = 1
- Si c'est la marque de fin d'expression ∅ JE1(i) = 4
- Si c'est une parenthèse qui se ferme) JE1(i) = 3
- Pour les autres signes JE1(i) = 2

Dans IE1(i) on range la ième unité syntaxique sous forme codée

- Si c'est un nombre IE1(i) = le nombre lui-même ≡ adresse du nombre dans le tableau JV.
- Si c'est un nom de variable IE1(i) = NUMVAR ('NOM') c'est à dire qu'on range l'adresse dans JV où sera rangée la valeur de la variable.
- Si c'est un signe opératoire, on le range tel quel dans IE1(i) sous forme alphanumérique.

L'organigramme (4) est l'analogue de l'organigramme (2) du compileur Algol

A partir des listes initiales IE1 et JE1 représentant la suite d'ordres arithmétiques sous leur forme normale, le programme réalise à la fois le passage de la notation habituelle à la notation post-fixée et la construction des ordres arithmétiques trouvés sous une forme codée selon les conventions que nous venons de définir.

Dans l'organigramme (4), nous avons utilisé autant que possible les mêmes noms pour représenter les concepts équivalents à ceux de l'organigramme (2). Ainsi:

l'équivalent de la liste E1 de l'organigramme (2) sont les listes IE1(i) et JE1(i)

" " " E3 " " " est la liste IE2(i)

" " " E2 " " " " " " " IE3(i)

COVAR est un compteur de variables qui permet de connaître la prochaine adresse libre du tableau JV.

La nième opération trouvée est repérée par son code opératoire, c'est à dire le numéro dans OPER1 du signe opératoire, rangé dans CODE(n) et par les trois adresses du tableau JV sur lesquelles l'opération aura lieu JK1(n), JK2(n), JK3(n).

On peut considérer que l'organigramme (4) joue le rôle d'un petit compileur qui à partir d'un programme symbolique source (ici la carte donnée F(X,Y,Z) = ...) construit la suite d'ordres exécutables formant le programme résultant.

La phase d'exécution est représentée par l'organigramme (5) qui exécute la suite d'ordres construite par l'organigramme (4) pour les jeux de variables indiqués dans les cartes données et range les résultats sous forme de table utilisable pour la suite du programme.

Dans l'exemple présenté, la situation est la suivante:
On suppose qu'on a décodé une carte donnée sous la forme

CASIMIR NOM F(X,Y,Z ....) = (X + 2) + Y (Y + 4) + ...

Au décodage par le prog. CASIM1, les renseignements suivants ont été rangés:

- NARG = Nombre d'arguments Y, Y, ... de la fonction F
- NØARG(I),I = 1,NARG : N° > 50 attribué à chaque argument X, Y ....

NOM est le nom alphanumérique d'une table d'éléments déjà lue et enregistrée, I est son numéro, ADLIST(I) + 1 est l'adresse de son premier élément dans la zone réservée aux tables, ADLIST(I+1) est l'adresse de son dernier élément (et l'adresse de la table suivante); la carte donnée précise ainsi que ce sont les éléments de la table NOM qui vont déterminer les différents jeux de valeurs des variables X, Y, Z .....

Les éléments de la table NOM sont des noms alphanumériques de représentations tels que [22110] ($\equiv \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \langle \sigma \rangle$ par exemple) représentés sur deux mots machine.

Supposons qu'on traite un élément de la table [22110].
Le sous programme SEGM extrait des deux mots alphanumériques $[22110]_{MA}$ ..... les valeurs numériques 2, 2, 1, 1, 0 des NARG arguments et les range

dans INU(1) .... (5).

On a déterminé un jeu de valeurs pour les variables X, Y, Z .... On les range à leur adresse dans JV

X = NOARG(J) n° attribué au Jème argument (Y par exemple)

JV(X) = INU(J) valeur de Y rangée dans JV [n°(Y)]

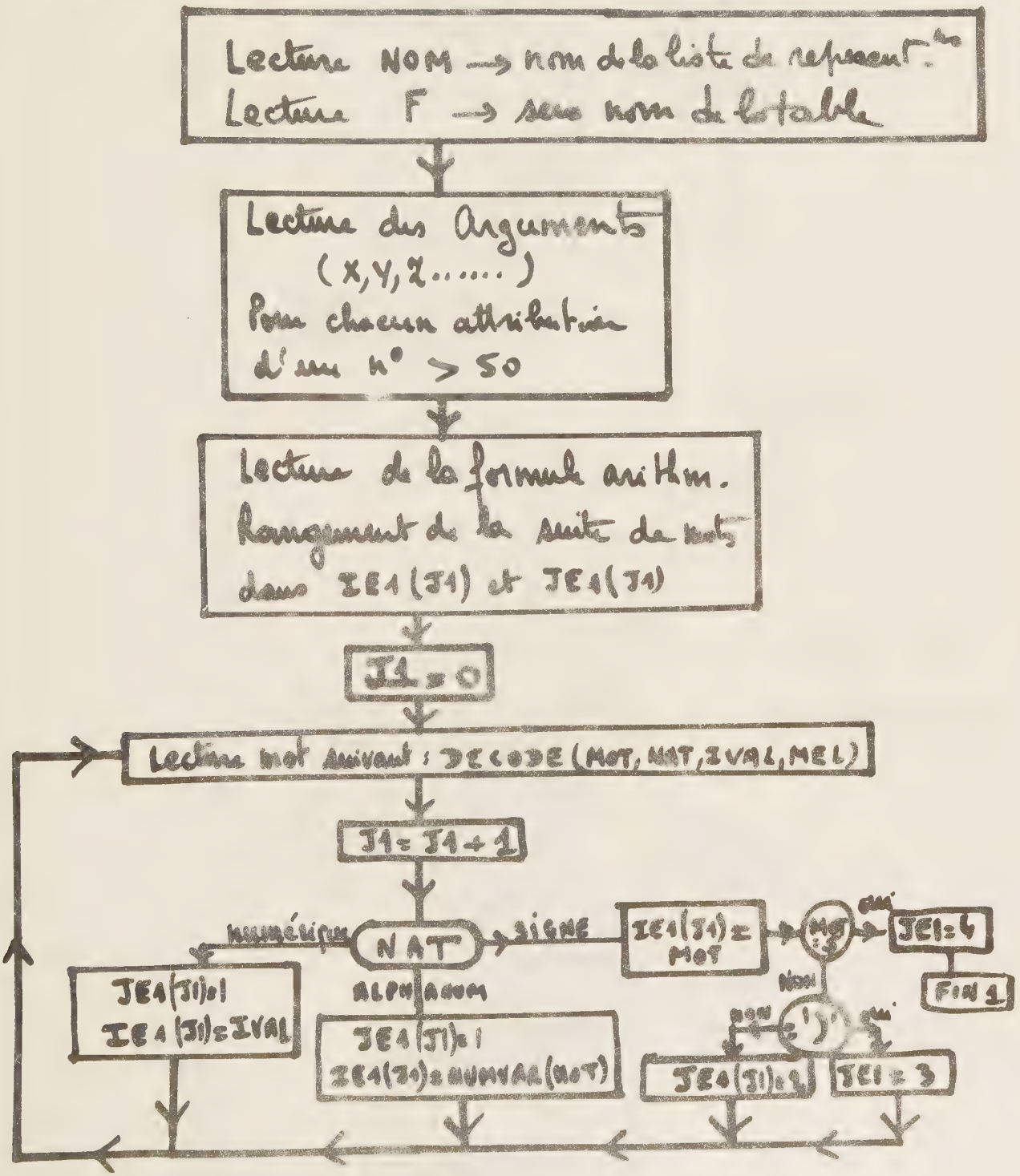
On peut maintenant faire exécuter la suite d'ordres déterminée par CASIM1 représentant le calcul de la fonction F pour le jeu de valeurs d'arguments trouvé. On range le résultat et on traite un autre élément de la table NOM.

On a ainsi réalisé une application simple et directe de la compilation Algol des ordres arithmétiques montrant qu'on peut programmer en Fortran une formule dont la forme n'est pas connue à l'avance. Nous allons voir maintenant comment on peut généraliser la méthode au problème beaucoup plus complexe de la programmation d'une formule angulaire très générale.

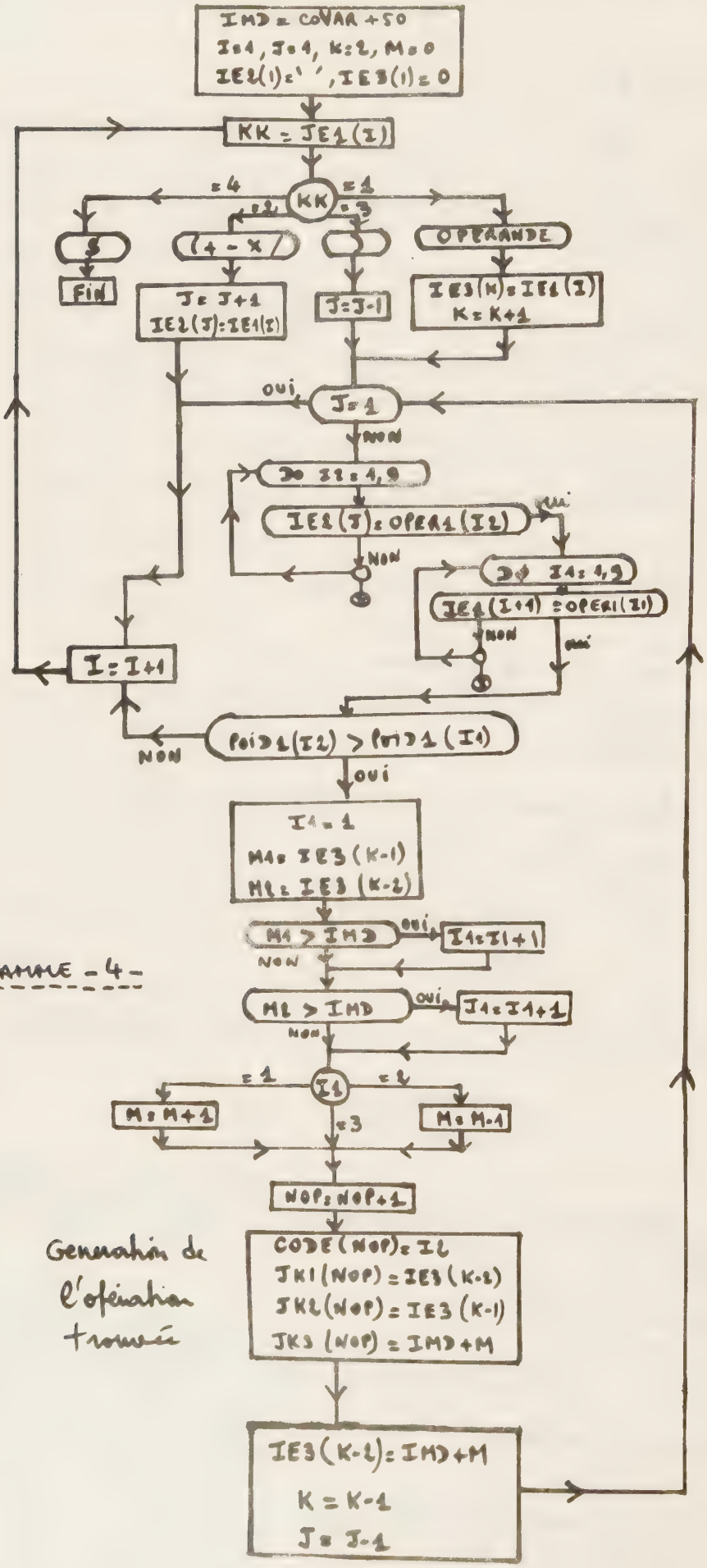
CARTE DONNEE :

CASIMIR NOM F(X,Y,Z,....) = (X+α)*Y(Y+β)/....

CASIM1 : Partie 1 : Construction de la suite à décoder IE1



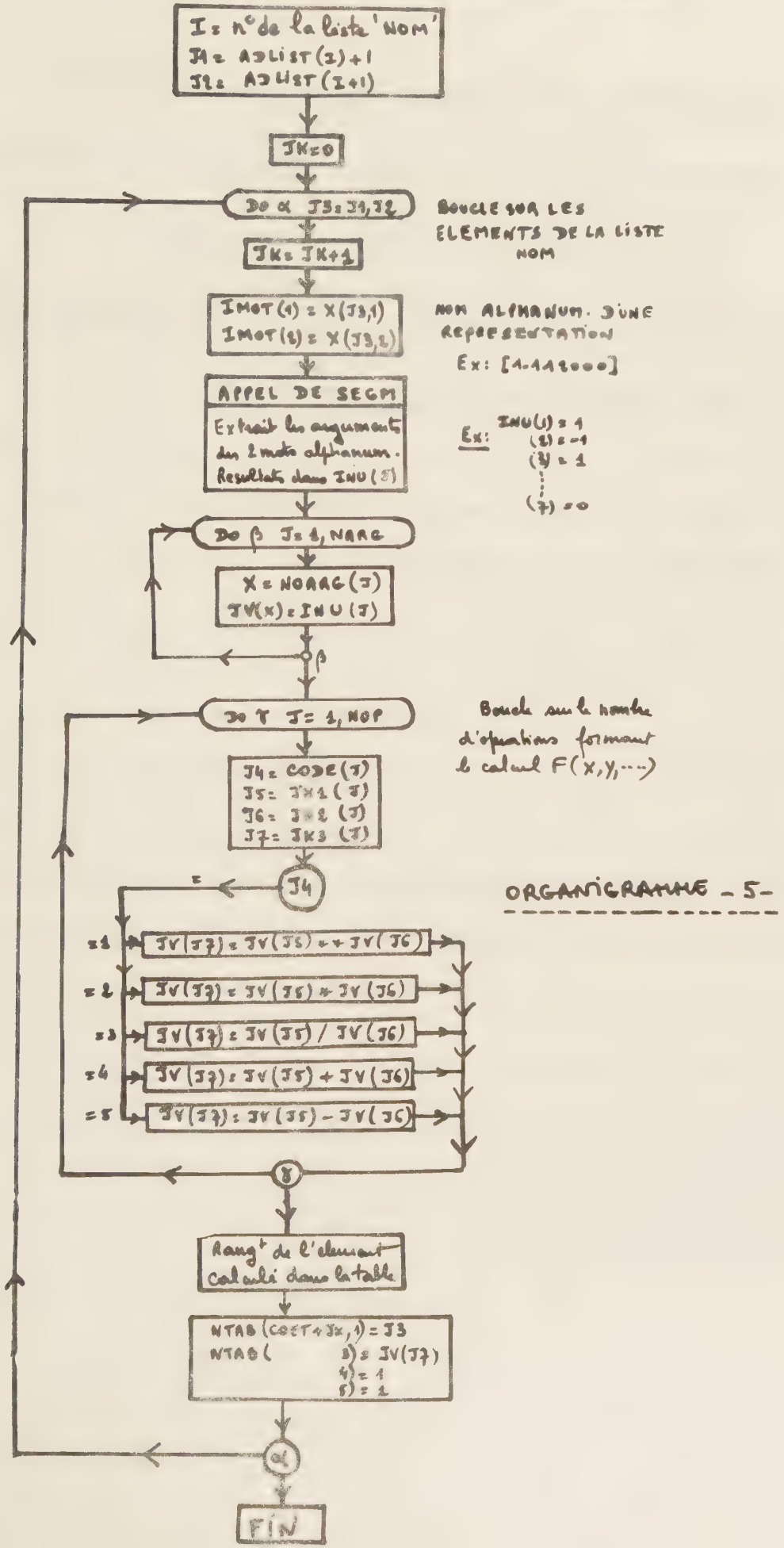
ORGANIGRAMME -3-



ORGANIGRAMME - 4 -

Generation de l'opération trouvée

CASIM2 : Execution des opérations trouvées
Construction de la table F



ORGANIGRAMME - 5 -

III) PROGRAMMATION D'UNE FORMULE LITTÉRALE ANGULAIRE QUELCONQUE

1°) Position du problème - Notations utilisées - Principe du codage

Considérons une formule quelconque, par exemple

$$X_0 = \sum_1 \Pi_1 \left[\sum_2 \Pi_2 + \sum_3 \Pi_3 * \left(\sum_4 \Pi_4 + \sum_5 \Pi_5 \right) + \sum_6 \Pi_6 \left[\sum_7 \Pi_7 \right] + \sum_8 \Pi_8 \left[\sum_9 \Pi_9 \left[\sum_{10} \Pi_{10} \right] \right] \right] \quad (1)$$

- Un signe $\sum_i$ signifie somme sur une (ou plusieurs) liste de variables.
- La notation Π_i signifie produit d'un ensemble de fonctions angulaires dépendant d'un certain nombre de variables, telles que des n_J, des tables, etc. .... par exemple

$$\Pi_i = (-1)^{S+L+J} \begin{Bmatrix} S & L & J \\ L' & S' & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & S'_1 & 1 \\ L_1 & L'_1 & 2 \\ S_1 & L_1 & 1 \end{Bmatrix} \text{Table 1} \; (\ell^n \alpha SL, \ell^n \alpha' S'L') S(L_1 L'_1) \; [S] \; [S'] \ldots$$

- Les jeux de variables nécessaires au calcul de la formule sont définis d'une part par les listes des signes $\sum_i$ et d'autre part par des données supplémentaires permettant de préparer le mécanisme général de l'avancement des variables non sommées. Ce n'est pas le problème qui nous intéresse ici et nous ne le considérons pas pour l'instant.

- Le signe $[$ est réservé aux sommes imbriquées les unes dans les autres, donc du type $\sum_x f(x) \sum_y g(x,y)$ alors que la notation $\sum_i \Pi_i \sum_k \Pi_k$ est le produit de deux sommes indépendantes du type $\left[\sum_x f(x)\right] \times \left[\sum_y g(y)\right]$.

Remarquons deux choses:

a) S'il n'y avait pas de crochets, on pourrait dire qu'on a à construire une suite d'opérations sur des quantités $(\sum \Pi)_x$.

C'est vrai, par exemple, pour $\sum_2 \Pi_2 + \sum_3 \Pi_3 * \left(\sum_4 \Pi_4 + \sum_5 \Pi_5\right)$.

Le problème par rapport aux ordres arithmétiques vient donc des sommes imbriquées qui se répartissent en plusieurs groupes pouvant contenir un nombre variable de $\sum$.

b) Des sommes imbriquées sont équivalentes du point de vue structure à des bouches "Do" Fortran imbriquées, mais leur nombre ici est variable.

On définit les notations suivantes:

X_i = une suite d'opérations sur des quantités Y_k définissant une séquence i ;

$Y_k = \sum_k \Pi_k X_k$, X_k pouvant exister ou non et correspondant ou non à l'ouverture d'un crochet [après Π_k.

Nous notons symboliquement $\sum_k \Pi_k : P_k$.

Donc Y_k s'écrit $Y_k = P_k X_k$

Dans l'exemple donné X_o, les notations permettent d'écrire

$$X_o = P1 \left[P2 + P3 * (P4 + P5) + P6 \left[P7\right] + P8 \left[P9 \left[P\ 10\right]\right]\right] \not\emptyset \quad (2)$$

et de définir les séquences:

Séquences	1	X_o = P1 X 1 + P8 X 8 = Y1 + Y8
	2	X1 = P2 + P3 ✱ (P4 + P5) + P6 X 6 = Y2 + Y3 ✱ (Y4 + Y5) + Y6
	3	X6 = P7 = Y7
	4	X8 = P9 X 9 = Y9
	5	X9 = P 10 = Y 10

Les P_i ont été numérotés dans l'ordre, mais ce n'est pas nécessaire.

On voit qu'une fois les séquences déterminées, on se trouve ramené pour chaque séquence au problème du codage d'un ensemble d'ordres arithmétiques sur des quantités Y_k. Mais à l'exécution, contrairement au cas précédent des fonctions arithmétiques simples, les Y_k ne sont pas des variables dont on connait facilement la valeur, mais sont elles-mêmes des fonctions à calculer $\sum_k \prod_k X_k$ définies par d'autres séquences.

On se trouve donc en face de trois problèmes principaux:

1) Trouver les séquences en lisant la forme symbolique (2) et les coder.

2) Pour chaque séquence trouvée, utiliser la méthode de compilation Algol pour coder la suite d'opérations sur les Y_k.

3) A l'exécution: Supposons qu'on ait écrit un sous-programme "Calcul d'un X(i)" et un sous-programme "Calcul d'un Y(k)".
Il faudrait que X(i) puisse appeler Y(k)

et que Y(k) " " X(k)

C'est impossible en utilisant les procédures "sous-programmes" du langage Fortran, qui n'est pas un langage récurrent. Dans un tel langage, une procédure A ne peut pas s'appeler elle-même et si une

procédure A appelle une procédure B, B ne peut appeler A. Or, c'est justement ce qui nous est nécessaire, c'est à dire qu'on devra simuler une récursivité croisée entre deux parties d'un même sous-programme.

A ces problèmes principaux s'ajoute celui de trouver un mode de rangement en mémoire des données de chaque P_i et des résultats du codage à la fois économique et pratique pour l'exécution.

2°) Détermination des séquences (sous-programme FORMU1 Partie 1)

a) Construction des listes initiales

Principe : On balaie l'expression X_o donnée sous la forme (2).

A un certain moment, on est dans une séquence i et on vient de lire un P_k.

- Si on lit le signe "[" on sort provisoirement de la séquence i et on entre dans la séquence k.

- Si on lit une opération, on ajoute cette opération à la liste de la séquence en cours.

- Si on lit le signe "]", on sort définitivement de la séquence en cours, on retourne à la séquence précédente.

L'ensemble de cette procédure est donné par l'organigramme (6) de la première partie du sous-programme FORMU1.

Le résultat est l'ensemble suivant:

- Le nombre de séquences S.

- Pour chaque séquence S le nombre NA(S) de mots de la liste initiale de la séquence et NØA(S,J) la liste elle-même (équivalente à la liste initiale E1 du paragraphe précédent).

Dans cet organigramme K repère le rang des crochets; chaque ouverture d'un crochet provoque l'augmentation de K d'une unité. Une séquence est repérable à la fois par son rang K et son numéro NUS(K) qui est le n° du X_K correspondant.

De même un crochet qui se ferme provoque K = K-1 on retourne à la séquence NUS(K).

LOGX(PI) sert à indiquer si on a la forme $Y_k = P_k$ ou $Y_k = P_k X_k$.

Lorsqu'on rencontre un P_i, LØGX(PI) est initialisé à FALSE.
La rencontre d'un crochet [provoque LOGX(PI) =.TRUE.
La valeur spéciale 159 est réservée pour repérer la fin d'une séquence;
156 " " " " une parenthèse qui se ferme.
NOS(PI) repère pour chaque P_i le n° de la séquence à laquelle il appartient. Exemple: Supposons que l'organigramme (6) balaie l'expression (2).

Signes rencontrés successivement et avancement de la valeur de K				Constitution des séquences			
On lit :	K=0	S=1	séquences ...	X_o	X1		X6
P1	On met Y1 dans la séquence X_o			Y1			
[	K = K+1 = 1						
P2	On met Y2 dans la séquence X_1				Y2		
+	"	+	" "		+		
P3	"		" "		Y3		
*					*		
(					(		
P6		Y6	X_1		Y6		
[	K = K+1	On entre dans X6					
P7		On met Y7 dans X6					Y7
]	K = K-1	On sort de X6					
		On retourne dans X1					
]	K = K-1	On sort de X1					
		On retourne dans Xo					
P8		On met Y8 dans Xo		Y8			
[	K = K+1						
	etc.----						

↑ Liste NOA(1,J)

On voit se constituer progressivement les cinq séquences que nous avions définies plus haut. L'organigramme (6) a donc le même rôle que l'organigramme (3) de la fonction CASIMIR.

b) Construction de la suite d'ordres exécutables

L'organigramme (7) de la 2ème partie du sous-programme FORMU1 réalise la construction des suites d'ordres exécutables à partir de la liste initiale NØA(S,J) de chaque séquence. L'ensemble des résultats est rangé dans le même tableau SEQ(J).

Exemple: On considère la séquence I. AD(I) repère l'adresse de départ dans SEQ(J) des informations concernant la séquence I.

Si, au cours de la construction, on trouve un Y_K, le code 100 est utilisé pour repérer l'opération "calcul de Y_K". Les autres codes opérations sont ceux définis précédemment dans le cas de l'opérateur de Casimir.

Exemple: Considérons la séquence I. L'adresse de départ dans SEQ(K) de la suite d'opérations codées est J = AD(I); alors à la fin de la construction par FORMU2 :

dans SEQ(J+2) est rangé le nombre d'opérations de la séquence X_I

Supposons SEQ(J+3) = 100 On sait qu'on doit calculer un Y_K

Alors SEQ(J+4) = K Numéro du Y à calculer

SEQ(J+5) = α Indique l'adresse dans un tableau pour le résultat (qui est un nombre Rotenberg)

⋮

L'optimisation des mémoires intermédiaires se fait pour chaque séquence mais pas indépendamment : Si pour une séquence I l'adresse maximale des mémoires intermédiaires est MAX, la séquence suivante utilise comme première adresse intermédiaire MAX + 1 .

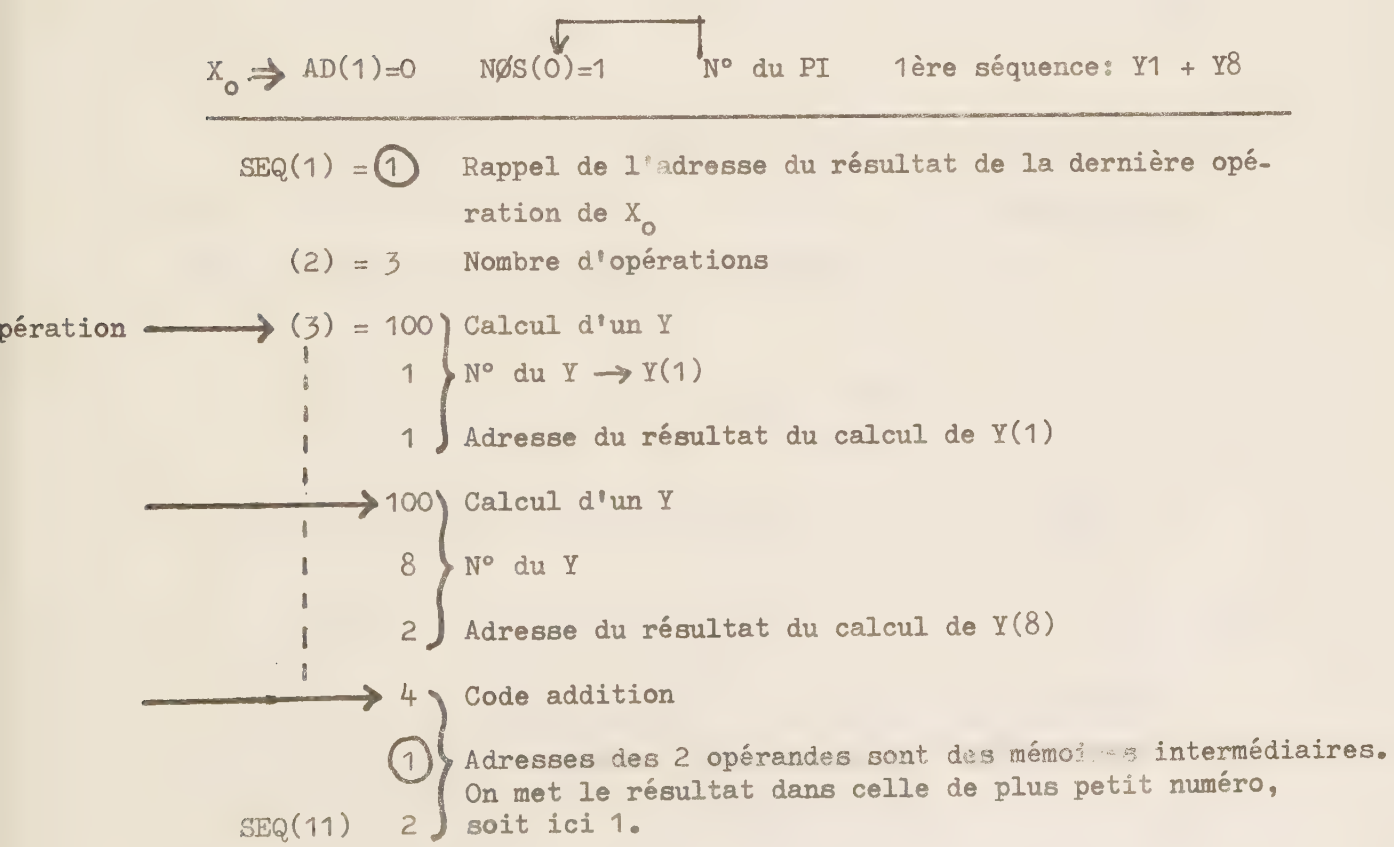
Soit	SEQ(I)		SEQ(I+1)	
		M1		M5
		M2		M6
		⋮		⋮
		M4 → MAX		MAX
		⋮		⋮
		M1		M5

On verra pourquoi un peu plus loin. Notons que toutes les adresses sont des adresses de nombres Rotenberg qui utilisent en fait 12 mémoires.

Enfin, si pour une séquence I d'adresse J = AD(I) l'adresse du résultat de la dernière opération de la séquence est β , on range cette adresse dans SEQ(J+1) avant de traiter la séquence suivante.

Reprenons l'exemple X_o = P1 [P2 + P3 * (P4 + P5) + P6 [P7] + P8 [P9 [P10]]] $\emptyset$

A la fin de la construction des séquences exécutables, on trouve dans les mémoires du tableau SEQ:



X_1 ⇒ AD(2)=11 NOS(1)=2 2ème séquence: Y2 + Y3 * (Y4 + Y5) + Y6

SEQ(12) = ③ Adresse de la dernière opération de X(1)

9 Nombre d'opérations

→ 100 Calcul d'un Y

4 N° du Y

3 Adresse du résultat dans MAX(1)+1 = 3

→ 100

5

4

→ 4

3 X_6 ⇒ AD(3)=40 NØS(6)=3 3ème séquence: Y7

4

→ 100 SEQ(41) = ⑤

3 (42) = 1 Nombre d'opérations

4

→ 2 → 100

3 7

4 SEQ(45) = ⑤ Résultat de Y7 dans MAX(2)+1=5

→ 100

6 X_8 ⇒ AD(4)=45 NØS(8)=4 4ème séquence: Y9

4

→ 4 SEQ(46) = ⑥

3 (47) = 1

→ 100 100

2 9

4 ⑥ résultat de Y9 dans 6

→ 4

③ X_9 ⇒ AD(5)=50 NØS(9)=5 5ème séquence Y10

SEQ(40) = 4 SEQ(51) = ⑦

1

100

10

SEQ(55) = ⑦ fin

A la fin de l'exécution du sous-programme FORMU1 on dispose des données suivantes:

1) Le codage des séquences dans SEQ(i)

2) Les numéros des séquences associés aux n° des P(I): NOS(PI)

3) Les variables LØGX(1) ... (10) sont .True. ou .False. suivant que pour un PI, XI existe ou pas (si ouverture d'un crochet => nouvelle séquence).

Les organigrammes (6) et (7) du sous-programme FORMU1 jouent le rôle des organigrammes (3) et (4) du paragraphe précédent (Casimir), mais ici on sait qu'il subsiste plusieurs problèmes pour la phase d'exécution.

a) Le calcul d'un $Y(I) \equiv P(I) \equiv \sum_I P(I)$ est en fait le calcul d'une somme, sur une variable ou une liste de variables, d'un produit de fonctions 6J( ) etc.....

b) Le calcul d'un $Y(I) \equiv (P(I)\ X(I)$ exige des possibilités de recursivité croisée où $X(I) \equiv$ suite d'opérations sur des $Y_{(K)}$.

3°) Décodage et rangement des renseignements concernant chaque $P_i = \Sigma_i \Pi_i$

a) Rangement des renseignements sur chaque somme Σ dans BA/(k)

On a vu qu'une des cartes "données" du programme est la formule donnée sous la forme symbolique (2), X_o= P1 [P2 + P3 .....

La lecture de cette carte déclenche le processus de décodage et de

codage décrit par les organigrammes (6) et (7). Cette carte doit être suivie de plusieurs autres du type

P1 = SOMME (LISTE 1 (S,L,N))*2*6J(S,L,1,1,L,S,J) .....

P3 = SOMME (X = 3,7,2) .....

P10 = 9J(S1, L1, J1, S2, L2, J2, J) TABLE (N, NP) .....

La lecture de la première carte P_i déclenche le décodage des renseignements concernant la somme, décodage décrit par l'organigramme (8) de la première partie du sous-programme FORMU2.

Trois cas peuvent se produire:

- Une somme sur une liste. On lui associe le code 3.
- Une somme sur une variable. " " " 1.
- Pas de somme, mais un Π_i seulement. On lui associe le code 0.

J = AD2(I) est l'adresse dans le tableau BAV(k) des renseignements concernant les sommes de P(I).

b) Rangement des renseignements concernant chaque Π_i = { }{ } δ( )....

Pour chaque P(I), une fois la liste BAV(k) construite, la 2ème partie du sous-programme FORMU2, correspondant à l'organigramme (9), contient la liste BAG(k) constituée de tous les renseignements, sous forme codée, des fonctions du $\Pi(I)$.

J = AD1(I) est l'adresse dans le tableau BAG(k) des renseignements concernant les fonctions du $\Pi(I)$. Le codage est explicité sur l'organigramme. On passe ensuite au décodage du P(I) suivant.

Exemple: Supposons la carte "donnée": P1 = SOMME(X=1,3,1)

* 6J(S,L,1,L,S,X)*2 * .....

AD2(1) = 0

1ère partie $\Sigma(I)$

BAV(1) =	1			Code 1 indique type de la Σ ; ici somme une variable (X)
(2) =	51			n° associé à la variable X par la fonction NUMVAR
(3) =	2	2	Minimum	Les variables pouvant être entières ou ½ entières sont toutes doublées pour ne manipuler que des entiers.
(4) =	6	2	Maximum	
(5) =	2	2	pas	

AD2(2) = 5

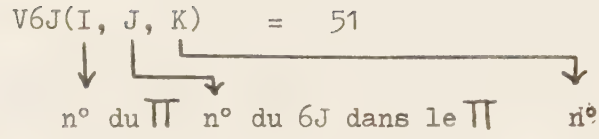
AD1(1) = 0

2ème partie $\Pi(I)$

BAG(1) =	2		Nombre de fonctions dans (1)
(2) =	8		Code associé au calcul d'un 6J
(3) =	52		N° de variable 'S'
(4) =	53	'L'	6 arguments du 6J
(5) =	2	2 * 1	
(6) =	53	'L'	
(7) =	52	'S'	
(8) =	51	'X'	
(9) =	12		Code associé au calcul d'un nombre a $\sqrt{b}/c$
(10) =	2		3 arguments a, b, c = $\frac{2\sqrt{1}}{1}$
(11) =	1		
(12) =	1		
(13) =	∅		

AD1(2) = 13

L'intérêt d'un rangement séquentiel dans 2 tableaux à 1 seul indice BAV et BAG contrairement au mode de rangement d'Agenac à l'aide de tableaux à plusieurs indices comme, par exemple



est de ne perdre aucune place en mémoire.

4°) Exécution de la formule - Simulation de la récursivité croisée

- Conditions pour qu'un programme soit récurrent

Supposons qu'à un instant de la phase d'exécution on se trouve dans un état $X^{(1)}$ donné. La séquence en cours appelle $X^{(2)}$. Avant d'exécuter la suite d'ordres représentant le calcul de $X^{(2)}$ il faut d'abord ranger l'état $X^{(1)}$ en cours. Lorsque le calcul $X^{(2)}$ sera fini on revient à l'état $X^{(1)}$ précédent et on doit être en mesure de reprendre le calcul dans les mêmes conditions exactement que lorsqu'on est sorti de la séquence.

Ainsi, si on considère les sommes imbriquées, on comprend que, si les états $X^{(i)}$ ou $Y^{(k)}$ ont été empilés dans un certain ordre au cours de l'exécution, ils seront rappelés obligatoirement dans l'ordre inverse. C'est donc encore une technique de piles qui résoud le problème et c'est ce principe qui a été utilisé pour écrire le sous-programme EXECU, constitué de deux parties "Calcul d'un $X^{(i)}$" et "Calcul d'un $Y^{(k)}$" récurrentes, c'est à dire pouvant s'appeler l'une l'autre, et qui à partir des données de SEQ et BAV reconstitue et exécute la formule.

Normalement, toutes les variables définissant un état $X^{(i)}$ ou $Y^{(k)}$ devraient être stockées dans un état de la pile correspondante. Mais ici les nombres sont des nombres Rotenberg complètement repérés par leur adresse dans un tableau spécial. Or, on se rappelle que, pour chaque séquence construite, on a utilisé des adresses différentes pour les mémoires intermédiaires. Donc pour sauvegarder les variables Rotenberg des séquences imbriquées, il suffit de ranger les adresses de ces nombres, ils ne seront pas détruits au cours de l'exécution des différentes séquences plus internes.

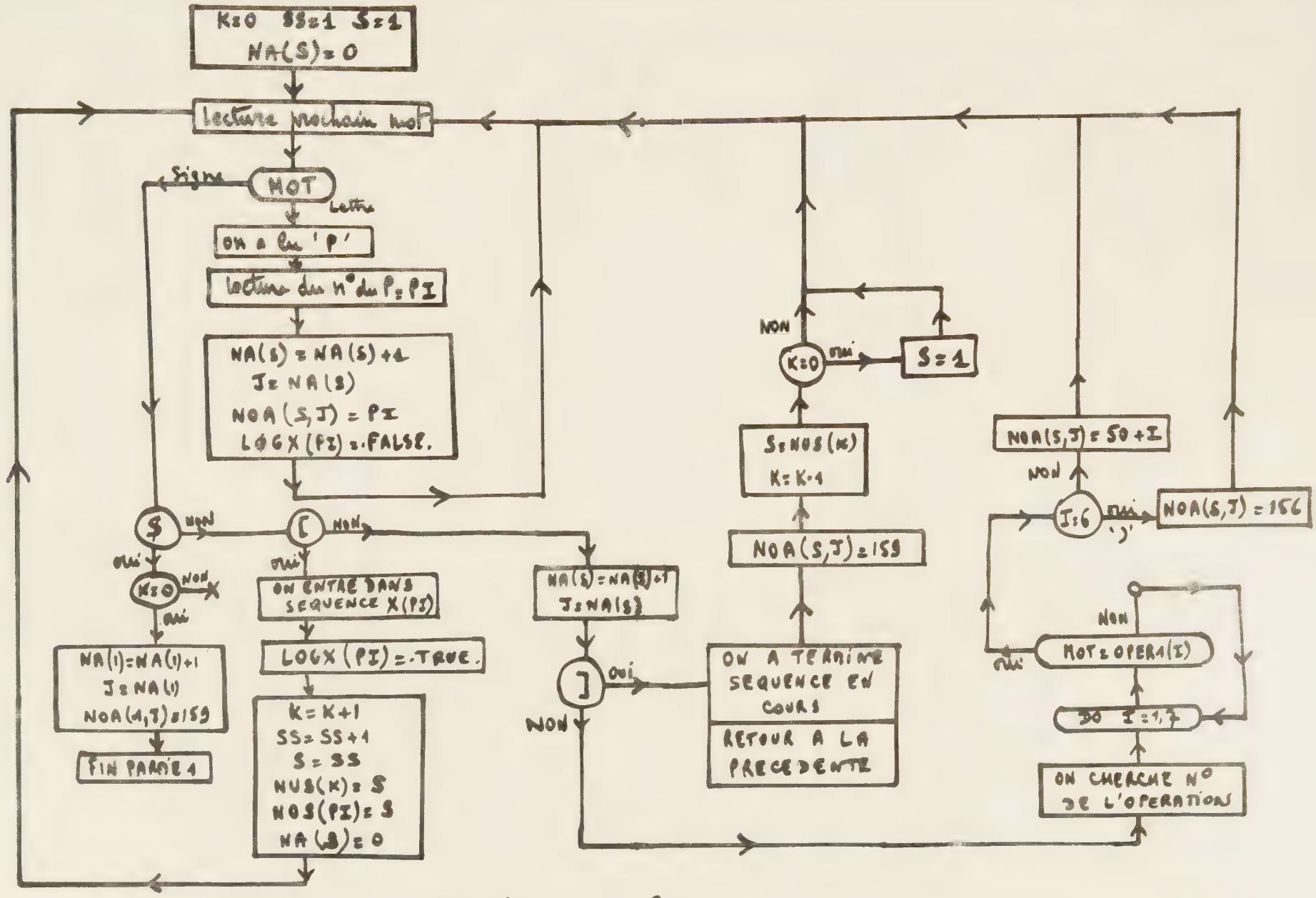
- L'organigramme 12 simplifié du sous-programme EXECU montre comment les piles d'états X et d'états Y se constituent et comment le sommet de chacune est rappelé.

Six variables seulement définissent un état X.

Onze " " " un état Y.

- L'organigramme (11) montre le calcul d'un $\Pi(I)$, c'est à dire d'un produit d'un certain nombre de fonctions angulaires, une fois que toutes les variables ont pris une valeur.

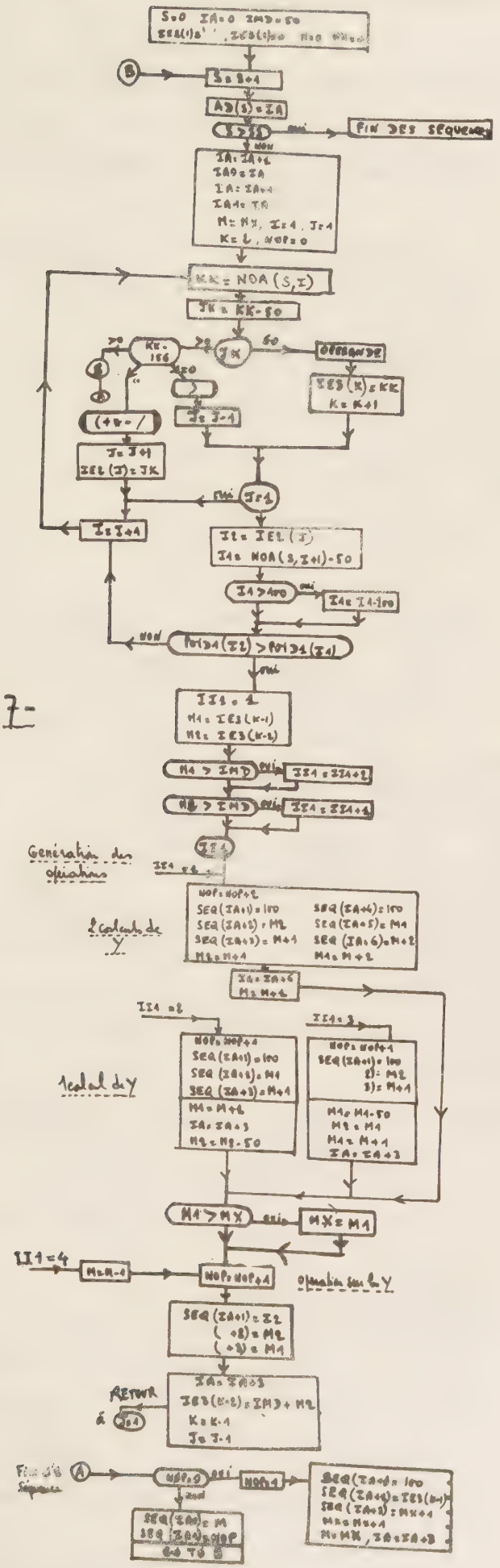
FORMU1: PARTIE 1 : DECODAGE P1[P2[P3=--(.)]]. CONSTRUC. DES LISTES DE CHAQUE SEQUENCE



ORGANIGRAMME -6-

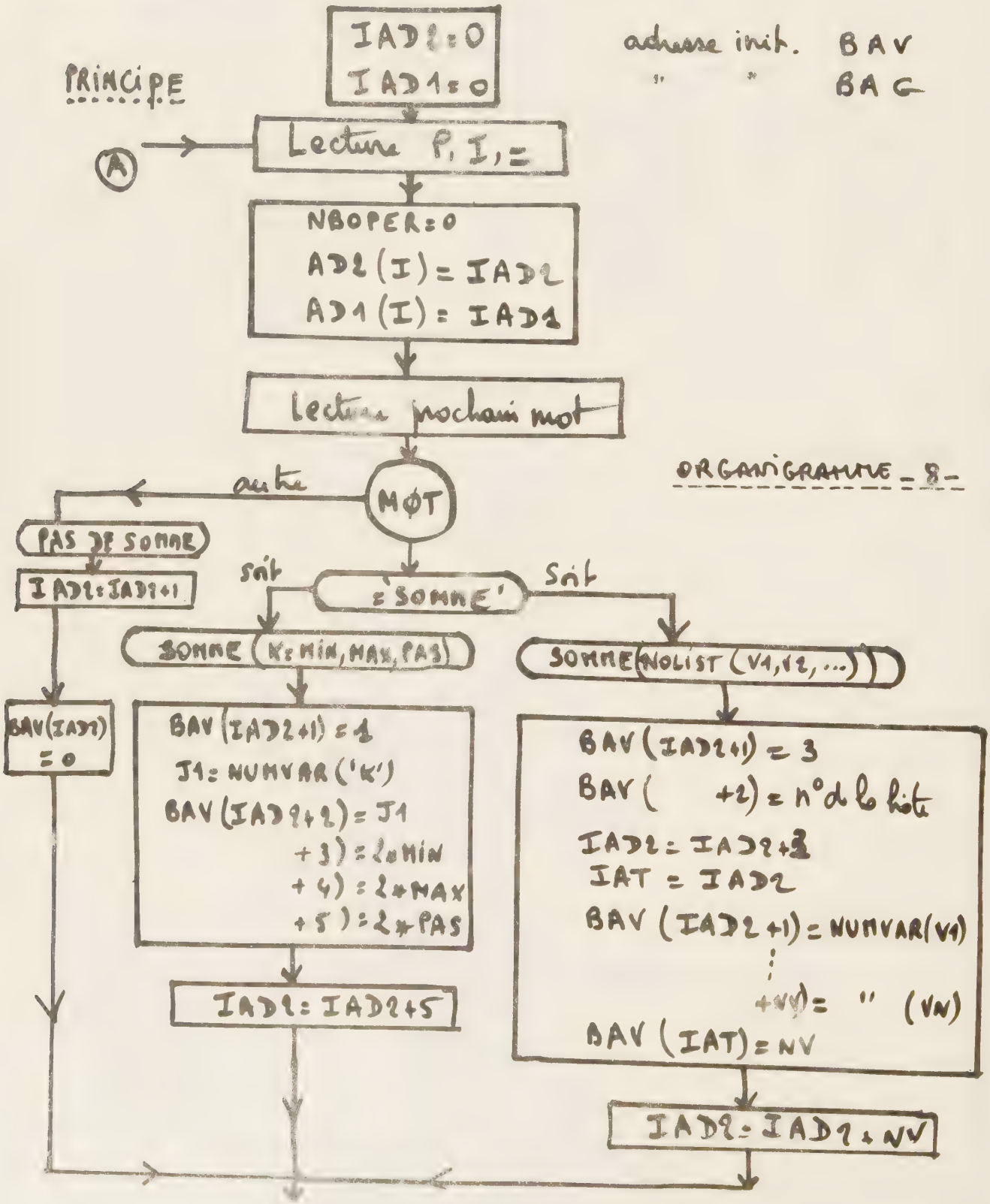
FORMAG : 2ème partie : CONSTRUCTION DES SEQUENCES

ORGANIGRAMME -7-



FORMUZ1 : DECODAGE DE CHAQUE $P(I) = \sum_i \pi_i$

1ère partie : Décodage $\sum_i$: Constitution de BAV(...)



FORMU2 : DECODAGE DE CHAQUE Π(I)

2e partie : Constitution de BAG(....)

PRINCIPE

IAD1 = 1
IAD = IAD1

.....> pour ranger nbre d'opérat.

↓

à chaque fonction pouvant apparaître dans Π on associe un numéro :

- 1 Fn Delta δ(,)
- 2 Delta triang.
- 3 Table ordin.
- 4 facteur de phase
- 5 crochets simples
- 6 Double crochets
- 7, 8, 9 resp. 3J, 6J, 9J
- etc....

Exemple de codage : Supposons qu'on ait trouvé :

...... * [3J (L, S, X, -ML, -2, ML)] * .....

↓

NBOPER = NBOPER + 1
BAG(IAD1 + 1) = 7 ...... Code du 3j

BAG(IAD1 + 2) = NUMVAR ('L')
+3) = " ('S')
+4) = " ('X')
+5) = – NUMVAR ('ML')
+6) = –4
+7) = NUMVAR ('ML')
IAD1 = IAD1 + 7

ORGANIGRAMME _9_

↓

Si on trouvé $: fin d'un Π(I)

↓

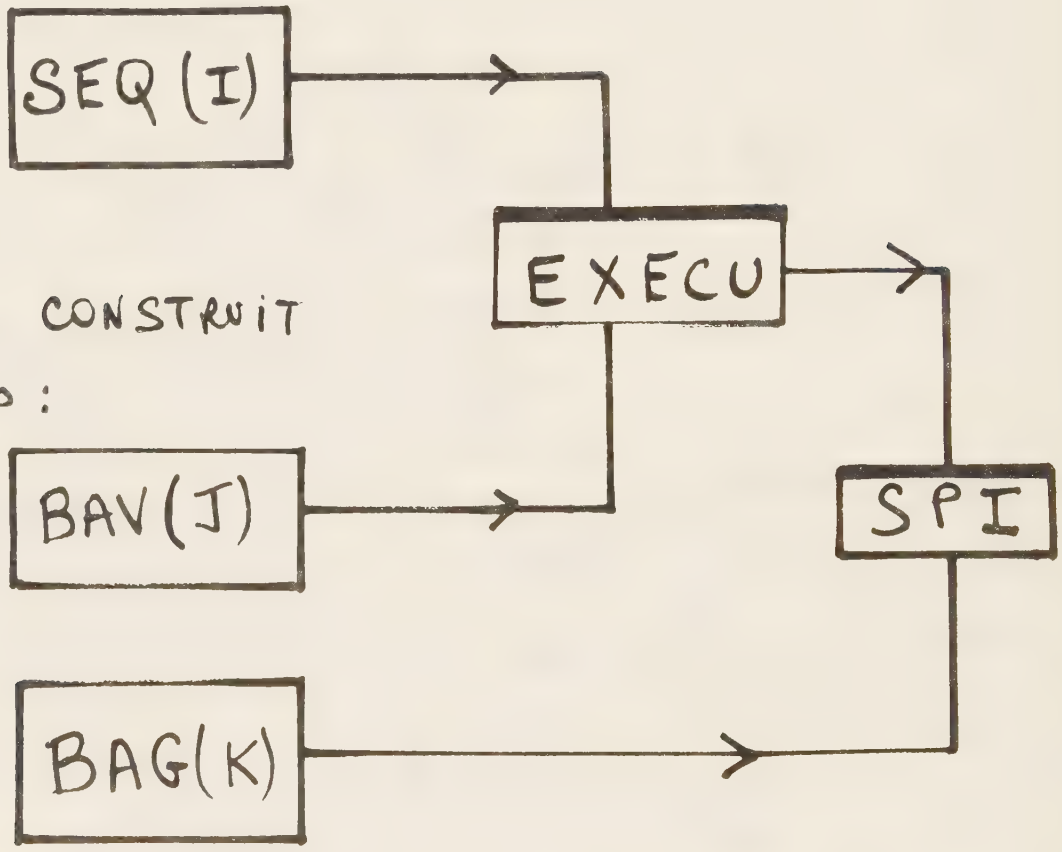
IAD1 = IAD1 + 1
BAG = (IAD1) = '$'
BAG(IAD) = NBOPER

↓

Retour en (A) CASIM2 (partie 1)
Debut décodage d'une autre P = Σ Π

Si autre $ après $ fin des P(I)

FORMU1 a CONSTRUIT
Bloc de codage :



ORGANIGRAMME - 10 -

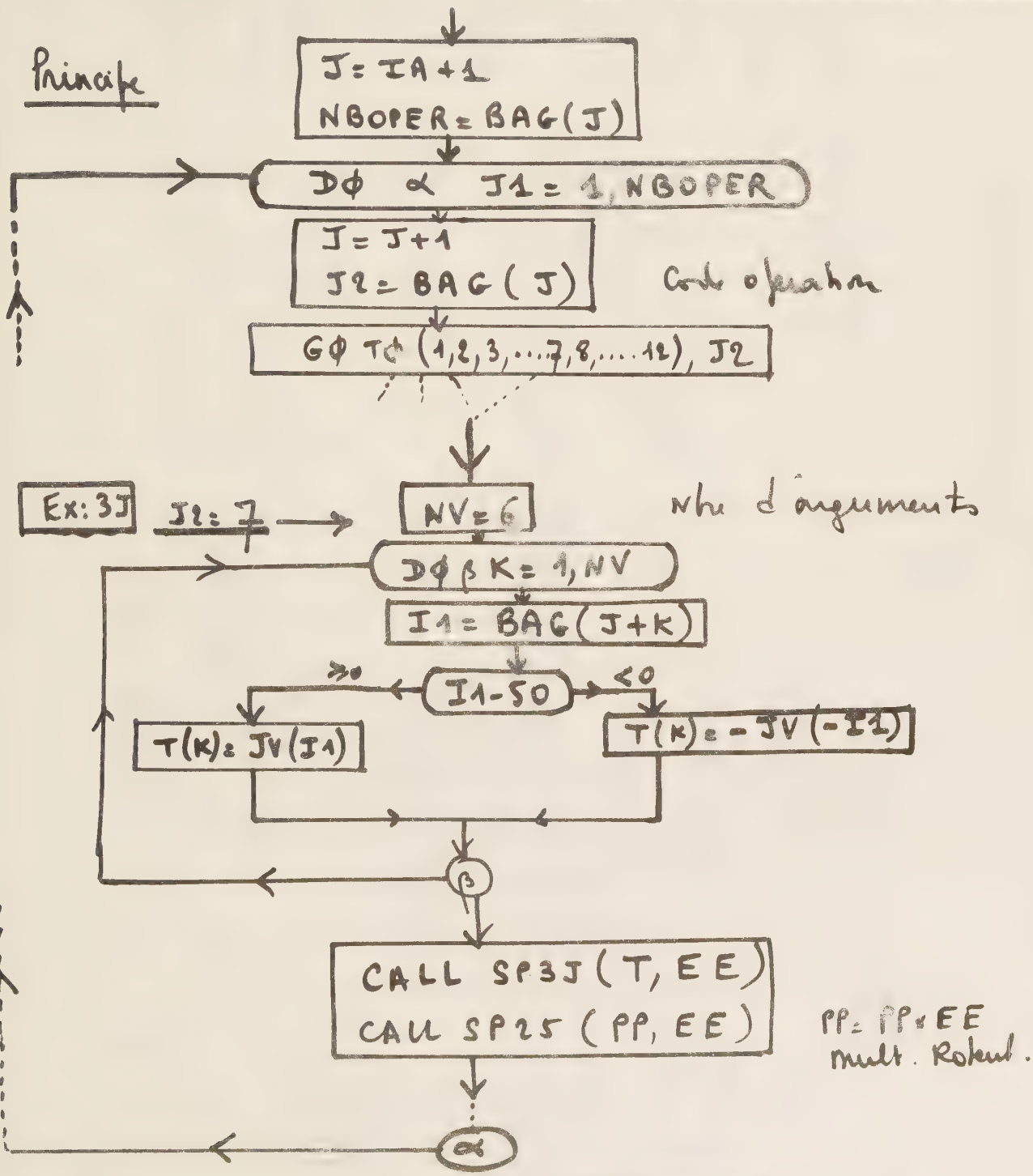
SPI = CALCUL D'UN π(I)

SUBROUTINE SPI (IA , PP)

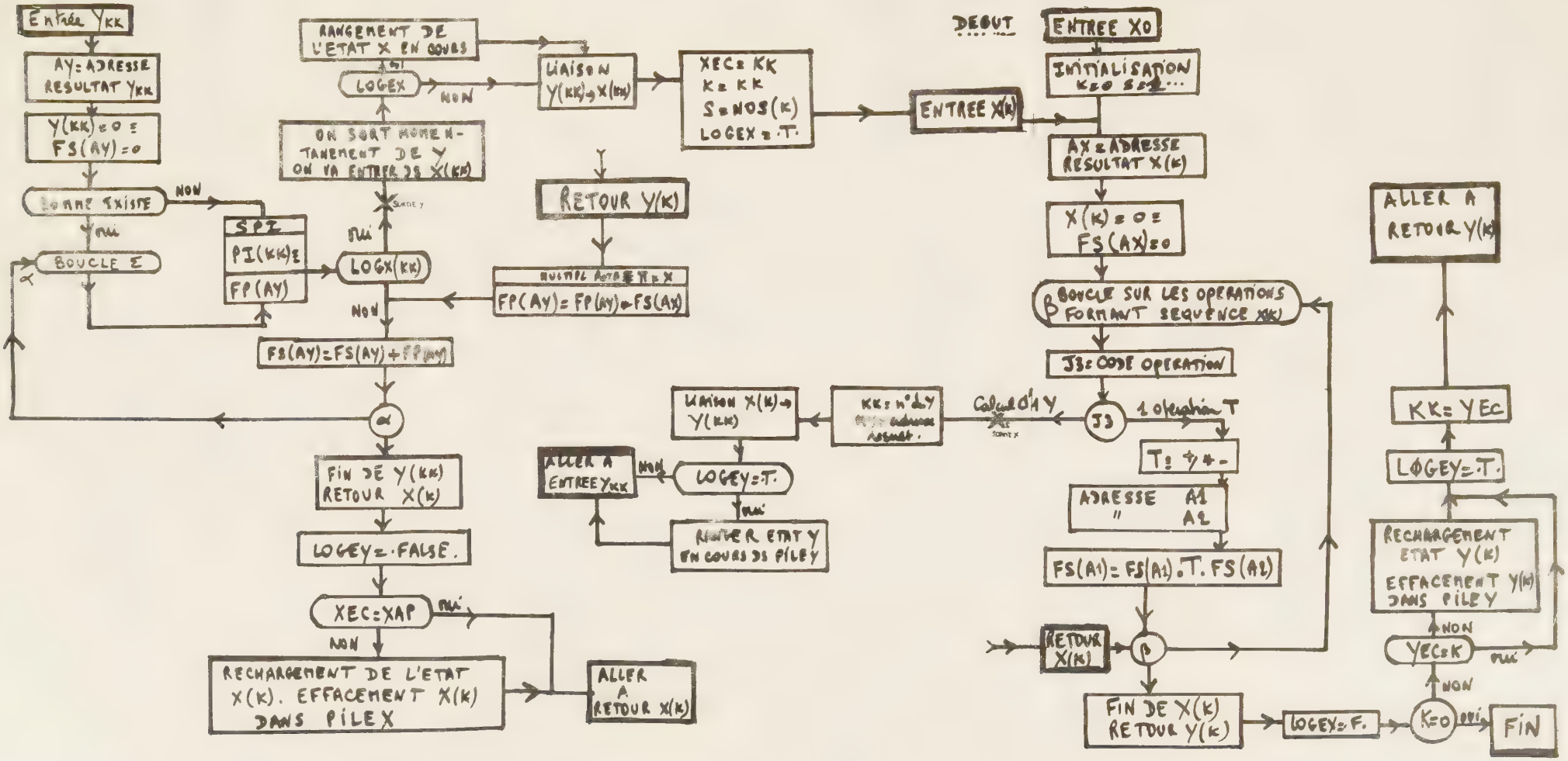
adresse = AD1(I) de départ dans BAG

Résultat dans PP(IM) = NBRE ROTENBERG

Principe



SP: EXECU



ORGANIGRAMME -12-

IV) ORGANISATION GENERALE DU PROGRAMME CLEGA1

1°) Introduction

Le problème est de calculer les coefficients a_{ij}^{k} donnés par la formule qui doit donc être exécutée pour tous les jeux de variables possibles. Ceux-ci doivent être déterminés à partir des listes initiales, mais dans un ordre précis facilitant le rangement des a_{ij}^{k} sous forme de systèmes à résoudre, c'est à dire sous forme matricielle; des listes doivent être construites qui préparent ce mode de rangement.

2°) Forme des données

L'organigramme A montre les formes des données

a) Données des listes de représentations, réductions, produits de Kronecker. Données des tables utiles.

b) Données des opérateurs de Casimir et de la liste de représentations sur laquelle chacun agit.

c)Eventuellement données de formules à calculer préalablement pour construire des tables nécessaires. Ces formules peuvent être très générales comme dans le paragraphe précédent, mais les variables doivent être complètement déterminées.

d) Demande de construction de liste pour l'étape k (si C.C.G. factorisables).

e) Demande de calcul des C.C.G. de l'étape k avec les renseignements suivants:

- Nom des variables
- Formules F_1 et F_2, où F_1 est la formule donnant les éléments diagonaux et F_2 la formule donnant les a_{ij}^{k} non diagonaux.

3°) Organisation des calculs

L'organigramme B montre l'organisation générale des calculs.

4°) Décodage

Une partie importante du programme est consacrée au décodage des différentes fonctions que peut remplir le programme. Il se fait au fur et à mesure qu'on rencontre une nouvelle fonction à remplir. Les cartes données sont analysées caractère par caractère à l'aide d'un sous-programme "DECODE" qui s'inspire du programme WDREAD écrit par TAUPIN pour le centre de calcul UNIVAC.

Si le programme rencontre les cartes du type

C REPRESENTATION

C REDUCTION

C LISTE .... etc.

il range les renseignements en mémoire sous forme appropriée.

Si le programme rencontre une carte CASIMIR .... LISTE .... il fait les opérations que nous avons décrites précédemment, c'est à dire :

- Codage de la séquence d'ordres exécutables
- Exécution de la séquence trouvée pour chaque représentation de la liste et constitution d'une table.

Si le programme rencontre une carte FORMULE - P1 [P2 [... (P3 + P4) .....]] suivie de la définition des différents P(I)

P1 = SOMME (...) 6J (...) TABLE ....

P2 = ...

il suppose que les seules variables inconnues sont celles sommées. Il réalise les opérations décrites dans le paragraphe précédent:

- Codage de la formule
- Exécution

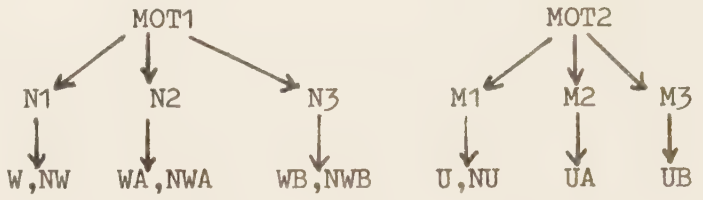
Si le programme rencontre CONSTRUCTION ETAPE K ... G ... H

L'organigramme C montre la construction de la liste résultante préparant l'avancement des variables pour le calcul des C.C.G., G ⊃ H de l'étape k.

La forme de la liste résultante est la suivante :

	a		
adresse	+1	NOM	MOT1 et MOT2 sont des mots découpés
	+2	x (x x MOT1)	en trois contenant les adresses des
	+3	MOT1	trois groupes de variables utiles.
		y (y x MOT2)	Exemple:
		MOT2	
		MOT3	

		MOT2	
		MOT3	
		MOT1	
		y	
		MOT2	
		MOT3	



Liste K

α = MOT3 = adresse de MOT2 ≡ adresse de MOT1' de la liste K-1

Ce procédé permet une recherche récurrente dans les listes successives construites pour les différentes étapes. C'est une généralisation du procédé utilisé dans AGENAC.

- Si le programme rencontre le mot "MATRICE" cf. AGENAC
- Si le programme rencontre le mot "CLEBSCH"
  - Le programme donne des numéros aux ensembles de variables W,NW
  - Attribue un type aux variables
  - Relie les variables et les listes qui définissent leur valeur.

- Type 1 : Variables externes. Chaque jeu définit un nouveau système.

  Exemple W(WA,WB)U

- Type 2 : Variables internes définissant les vecteurs lignes et les vecteurs colonnes.

  Exemple: ligne UA,UB

  colonne UAP,UBP

- Type 3 : Variables fixées de type externe.

  Exemple: L

- Type 4 : Variables fixées de type interne.

  Exemple: LA,LB

- Type 5 : Variables indépendantes.

5°) Avancement des variables et exécution

L'organigramme D représente schématiquement le rôle de chaque type de variables.

A l'aide des renseignements précédents et en particulier de la liste de l'étape k, le programme détermine dans l'ordre souhaité les différents jeux de variables pour lesquelles on va exécuter la formule. Les fonctions remplies sont successivement :

FORME DES DONNEES

C REPRES.... NOM1 N RESTRI 2

(000) 1 2
(100) 1 2
(200) 1
(11-1)
(221) A 1
(221) B 1

C REPRES.. NOM2 N

(00)
(10)
(21) A
(21) B

C REDUCTION

(000) 1 (00)
(100) 2 (00)
(10)

ORGANIGRAMME -A-

C KRONECKER NOM3 NOM1 N

110 100 3 (100)
(200)
(221)

110 200 ... ...

CASIMIR NOM1 F(U,V,W) = (U+1) * (V+2) * (W+1) ...

CASIMIR NOM2 G(X,Y) = (X+2) * Y

CONSTRUCTION ETAPE 1 NOMX NOM1 NOM2

CONSTRUCTION — 2 Y — 2 —

FORMULE TABLEF(· — ·)

P1[P2(P3+P4)] + P5[P6(P7)] $

P1= SOMME( ){—}· - - - - $

P2= ·— - - - -

· · —— — —— — - · $ $

CLEBSCH ETAPE 1 NOM1 NOM2 NOM3

F1 * (UA, NUA ; LA, NLA + UB, NUB ; LB, NLB / U, NU ; L, NL)
+ SOMME (LAP, LBP) * F2 * (UA, NUA ; LAP, NLAP +
UB, NUB ; LBP, NLBP / U, NU ; L, NL) $

F1 = G( ) + F( ) + - - - $

FORMULE F2 $

P1 $

P1 = SOMME (K = 1,3,2) - 2/3 * 6J (LP1, LP2, L, L2, L1, K)
TABLE VK (K ; UA, LA ; UA, LPA) * TABLE VK
(K ; UB, LB ; UB, LBP) $

ORGANIGRAMME -A- (Suite)

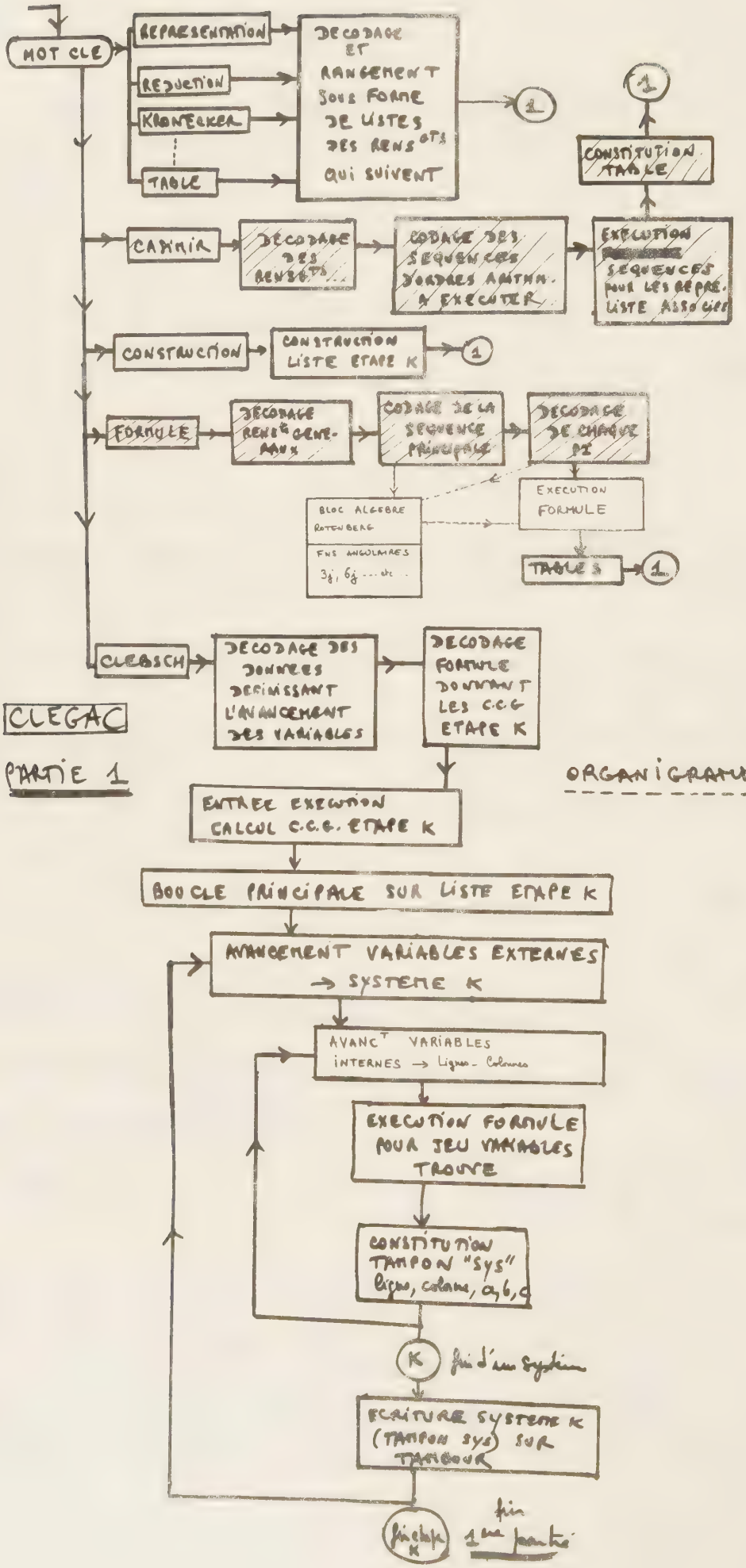
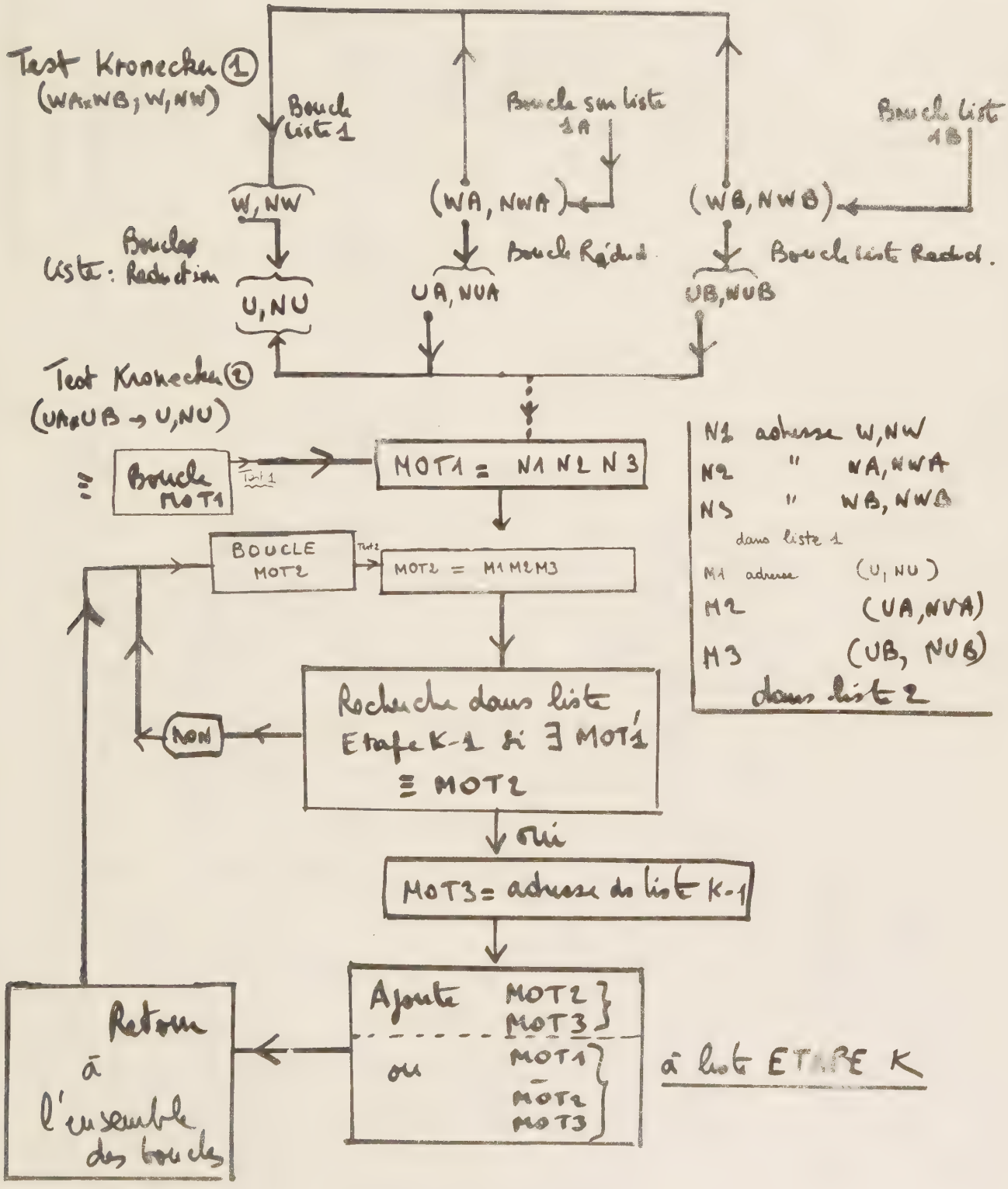
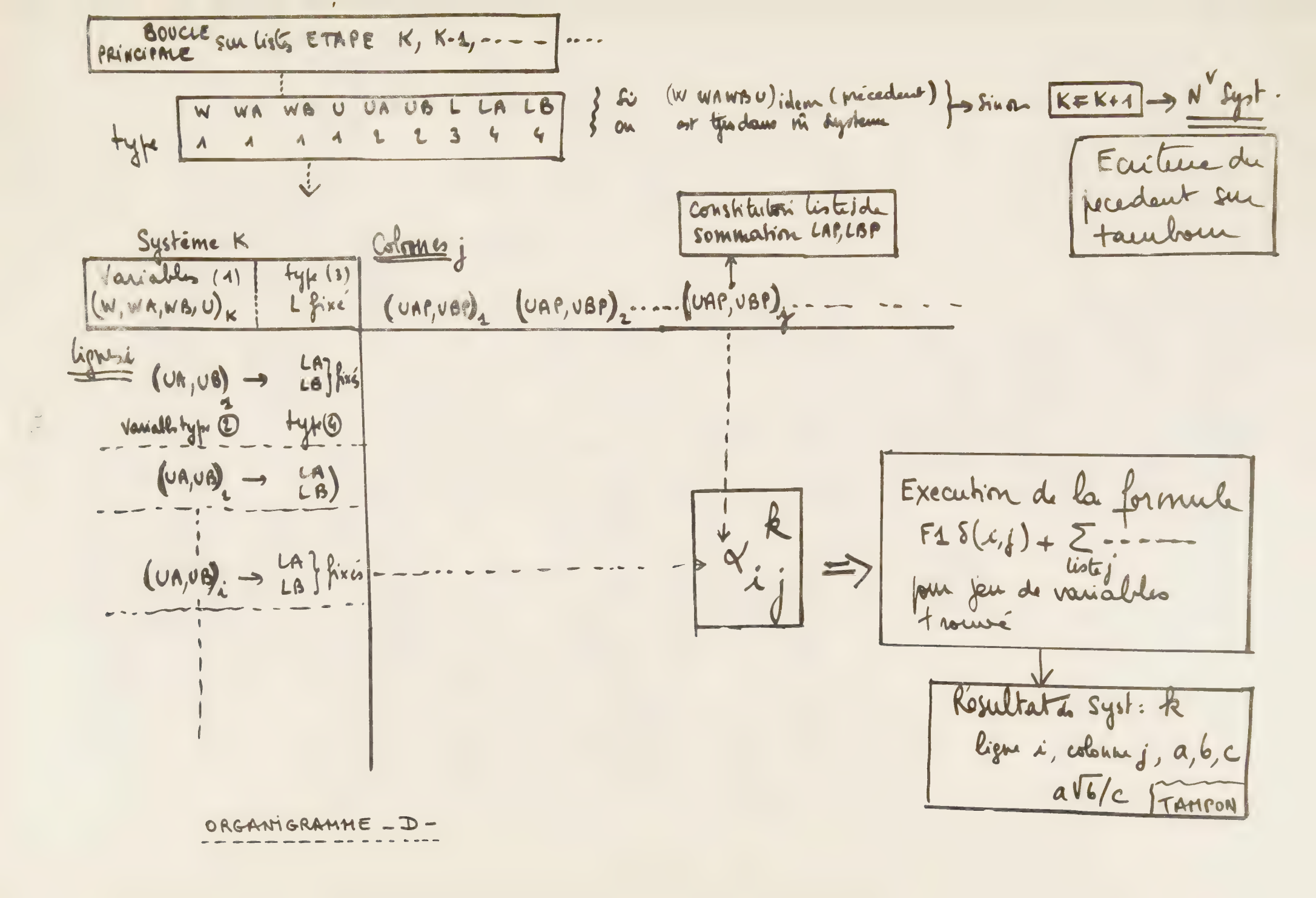

MOT CLE
REPRESENTATION
REDUCTION
KRONECKER
TABLE
DECODAGE ET RANGEMENT SOUS FORME DE LISTES DES RENGTS QUI SUIVENT
1
1
CONSTITUTION TABLE
CAMMA
DECODAGE DES RENGTS
CODAGE DES SEQUENCES D'ORDRES AMTHN. A EXECUTER
EXECUTION SEQUENCES POUR LES REPRE. LISTE ASSOCIEE
CONSTRUCTION
CONSTRUCTION LISTE ETAPE K
1
FORMULE
DECODAGE RENGTS GENERAUX
CODAGE DE LA SEQUENCE PRINCIPALE
DECODAGE DE CHAQUE PI
BLOC ALGEBRE ROTENBERG
FNS ANGULAIRES 3j, 6j ... etc
EXECUTION FORMULE
TABLES
1
CLEBSCH
DECODAGE DES DONNEES DEFINISSANT L'ARRANGEMENT DES VARIABLES
DECODAGE FORMULE DONNANT LES C.C.G ETAPE K
CLEGAC
PARTIE 1
ORGANIGRAMME -B-
ENTREE EXECUTION CALCUL C.C.G. ETAPE K
BOUCLE PRINCIPALE SUR LISTE ETAPE K
ARRANGEMENT VARIABLES EXTERNES → SYSTEME K
AVANCT VARIABLES INTERNES → Ligne - Colonne
EXECUTION FORMULE POUR JEU VARIABLES TROUVE
CONSTITUTION TAMPON "SYS" ligne, colonne, a, b, c
K
fin d'un Système
ECRITURE SYSTEME K (TAMPON SYS) SUR TAMBOUR
finchaîne K
fin 1ère Jonction

Schéma Construction Liste ETAPE K>1



ORGANIGRAMME -C-


BOUCLE PRINCIPALE sur listes ETAPE K, K-1, ---- ....
type
W WA WB U UA UB L LA LB
1 1 1 1 2 2 3 4 4
si ou (W WA WB U) identique (précédent) ou sur type dans un système
Sinon K=K+1 → N° Syst.
Ecriture du précédent sur tambour
Constitution liste de sommation LAP, LBP
Système K
Variables (1) (W, WA, WB, U)K
type (3) L fixé
Colonnes j
(UAP, UBP)1 (UAP, UBP)2 ..... (UAP, UBP)j
ligne i
(UA, UB) → LA LB fixés
variable type (2) type (4)
(UA, UB)i → LA LB
(UA, UB)i → LA LB fixés
αkij
Execution de la formule
F1 δ(i,j) + Σ listej
pour jeu de variables trouvé
Résultat du Syst: k
ligne i, colonne j, a, b, c
a√b/c TAMPON
ORGANIGRAMME -D-

Codage de la formule F1

Codage de la formule F2

Exécution: Calcul des a_{ij}^{k}, c'est à dire exécution de la formule pour chaque jeu trouvé et écriture des systèmes sur fichier de sortie.

CONCLUSION DE LA 1ère PARTIE

La description précédente montre que le programme CLEGA1 est conçu comme un petit compileur capable de construire et d'exécuter la suite d'ordre représentant le calcul de n'importe quel type de formule angulaire . Un programme important à la fois par son grand nombre de sous-programmes et par sa structure logique complexe, pose de grands problèmes de mise au point, même lorsque des commentaires en facilitent la lecture et qu'une programmation modulaire permet de délimiter chaque fonction remplie. On peut dire qu'un tel programme n'est jamais terminé et demande périodiquement une révision complète. Ainsi, dans la version actuelle, plusieurs problèmes n'ont pas été abordés:

1) La prévision de nombreuses options différentes d'édition des résultats.

2) L'écriture d'un mode de recherche rapide dans les grosses tables, problème qui souvent est une limitation importante dans les

calculs angulaires standards.

Le langage Fortran est réputé pour sa très grande facilité d'utilisation, mais aussi pour sa grande rigidité. Nous espérons avoir montré que même un langage symbolique simple offre des possibilités presqu'équivalentes à celles d'un langage machine. Néanmoins c'est au prix d'une écriture complexe. Bientôt les nouveaux langages tels que PL1 ou Algol 68 seront utilisables dans les centres de calcul et faciliterons la conception, l'écriture et la mise au point d'un programme tel que CLEGA1.

2ème PARTIE

Résolution des systèmes linéaires sous forme exacte : CLEGA 2

I) Introduction

La méthode de calcul des coefficients de Clebsch-Gordan décrite au chapitre I définit k systèmes linéaires homogènes de n équations à n inconnues $\sum_{ij} a_{ij}^{k} x_j = 0$ où les x_j sont les C.C.G. cherchés. Les coefficients a_{ij}^{k}, donnés par une formule angulaire générale, sont calculés sous forme exacte par CLEGA 1 et rangés sous forme de systèmes à résoudre.

On sait que les x_j sont les coefficients d'une transformation linéaire du type

$$|(u_1u_2)u\varphi\rangle = \sum_{\varphi_1\varphi_2} \langle u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2 | u\varphi\rangle \, |u_1\varphi_1, u_2\varphi_2, \varphi\rangle \qquad (1)$$

et que la méthode consiste à faire agir l'opérateur G sur les 2 membres de cette équation :

$$G|(u_1u_2)u\varphi\rangle = G \sum_{\varphi_1\varphi_2} \langle u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2 | u\varphi\rangle \, |u_1\varphi_1, u_2\varphi_2, \varphi\rangle$$

$$G(u)|(u_1u_2)u\varphi\rangle = \sum_{\varphi_1\varphi_2} \langle u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2 | u\varphi\rangle \, G\,|u_1\varphi_1, u_2\varphi_2, \varphi\rangle \qquad (2)$$

G est diagonal dans la base $|(u_1u_2)u\varphi\rangle$ avec la valeur propre G(u). La transformation (2) est équivalente à une diagonalisation de la matrice de l'opérateur G construite sur la base $|u_1\varphi_1, u_2\varphi_2, \varphi\rangle$ dont on connait a priori les valeurs propres ; elle conduit donc à un système d'équations linéaires pour chaque ensemble de valeurs $(u_1u_2)\, u\, \varphi$ données. La même valeur de G(u) pour différents U correspond à une racine multiple d'ordre α et les systèmes homogènes n x n correspondants sont d'ordre $n - \alpha$, c'est-à-dire que α équations sont dépendantes des autres. Dans ce cas, on doit déterminer α solutions orthonormées arbitraires.

II) Principe général de la méthode de résolution choisie

1°) Mise en évidence des équations proportionnelles par triangularisation

Il est indispensable de connaître, avant d'entrer dans le bloc "résolution" du programme la dégénerescence exacte du système en cours de traitement et le problème est résolu par une triangularisation préalable.

Considérons le système suivant :

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = \ldots + a_{2n}x_n &= 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \\ a_{n1}x_1 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a_{nn}x_n &= 0 \end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \ldots a_{1n} \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1} \ldots\ldots\ldots a_{nn} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ \\ x_n \end{vmatrix} = 0$$

et appelons $a_{ij}^{(k)}$ la valeur de l'élément a_{ij} après k étapes de substitution.

La triangularisation consiste à utiliser l'algorithme de Gauss correspondant aux transformations successives :

$$\boxed{a_{kj}^{(k)} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad ; \quad a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k)}} \qquad (3)$$

et à n'appliquer ces transformations qu'aux lignes situées au-dessous de la ligne k traitée.

Si un pivot $a_{kk}^{(k-1)}$ est nul on échange la ligne traitée avec une autre située en-dessous. De façon explicite la suite des opérations (3) correspond aux transformations suivantes :

a) Ligne 2 : On cherche la combinaison des lignes 1 et 2 qui annule le coefficient a_{21} de x_1.

On a alors un système du type

$$\begin{aligned} &1 \ldots\ldots\ldots a_{1n} \\ &0 \quad a_{22} \ldots\ldots\ldots a_{2n} \\ &a_{31} \ldots\ldots\ldots \end{aligned}$$

b) Ligne 3 : On cherche - la combinaison des lignes 1 et 3 qui annule le coefficient a_{31} de x_1

- la combinaison de la ligne 2 avec la combinaison précédente (1 et 3) qui annule a_{32} de x_2

Le système est alors $1.....a_{1n}$

$0\ \ 1....a_{2n}$

$0\ \ 0....a_{33}$

$a_{41}.....$

:

C'est-à-dire qu'on a déterminé une combinaison α_1, α_2 des 2 premières lignes qui annule les 2 premiers coefficients a_{31} et a_{32}.

c) Ligne k : On cherche de même une combinaison $\alpha_1 \ldots \alpha_{k-1}$ des k - 1 premières lignes qui annule les (k-1) premiers coefficients de l'équation k.

On comprend alors que si p équations sont des combinaisons linéaires des (n-p) autres les p dernières lignes seront des lignes complètement nulles.

2°) <u>Résolution des systèmes</u>

Les systèmes sont homogènes, donc un système normal (n x n) correspondant à une valeur propre G (u) non dégénérée est d'ordre (n-1) et la dernière ligne est toujours nulle. On résoud le système par rapport à x_n eton normalise la solution obtenue.

Si le système admet k lignes nulles on sait donc ainsi qu'il correspond à une valeur propre G(u) d'ordre k et que k solutions arbitraires orthonormées peuvent être trouvées. On utilise alors le procédé suivant :

On impose (k - 1) inconnues $x_i = 0$ soit $x_n = x_{n-1} = \ldots\ldots x_{n-(k-1)} + 1$.
La résolution du système par rapport à $x_{n-(k-1)}$ détermine une première solution.

La solution suivante est d'une part solution du système, d'autre part orthogonale à la première solution. Cette dernière condition fournit une équation supplémentaire qu'on ajoute au système. On impose (k-2) inconnues $x_i = 0$ soit $x_n = x_{n-1} = \ldots x_{n-(k-2)+1} = 0$. La résolution par rapport à $x_{n-(k-2)}$ détermine une deuxième solution et une deuxième équation supplémentaire.

L'avant dernier système à résoudre correspond à $x_n = 0$ et le dernier système est complètement défini. On a déterminé ainsi k solutions arbitraires orthonormées.

3°) Résolution sous forme exacte - Rationnalisation des systèmes

Du fait que les calculs angulaires à l'aide de base d'états standard ne mélangent pas les irrationnalités les systèmes de départ construits par CLEGA1 ont des coefficients de la forme

$$\frac{a_{11}\sqrt{b_{11}}}{c_{11}} \quad \frac{a_{12}\sqrt{b_{12}}}{c_{12}} \quad \ldots\ldots \quad \frac{a_{1n}\sqrt{b_{1n}}}{c_{1n}} = 0$$

$$\frac{a_{21}\sqrt{b_{21}}}{c_{21}}$$

$$\frac{a_{n1}\sqrt{b_{n1}}}{c_{n1}} \quad \frac{a_{n2}\sqrt{b_{n2}}}{c_{n2}} \quad \ldots\ldots \quad \frac{a_{nn}\sqrt{b_{nn}}}{c_{nn}} = 0$$

et le rapport des irrationnalités des 2 composantes x_i et x_j est le même dans toutes les équations. On peut donc rationnaliser le système, par rapport par exemple à la dernière colonne et mettre en mémoire l'irrationnalité de chaque x_i.

a) Rationnalisation par rapport à la dernière colonne

$$I(1) = I(x_1) = I\left(\frac{x_1}{x_n}\right) = \frac{b_{11}}{b_{1n}} = \frac{b_{21}}{b_{2n}} = \ldots \frac{b_{n1}}{b_{nn}}$$

$$I(i) = I(x_i) = I\left(\frac{x_i}{x_n}\right) = \frac{b_{11}}{b_{1n}} = \frac{b_{2i}}{b_{2n}} = \ldots \frac{b_{ni}}{b_{nn}}$$

Posons $\sqrt{\frac{b_{11}}{b_{1n}}}\, x_1 = x'_1 = I(1)\, x_1$

$$\sqrt{\frac{b_{1i}}{b_{1n}}}\, x_i = x'_i = I(i)\, x_i$$

On obtient le système suivant :

$$\frac{a_{11}}{c_{11}} I(x_1)\, x_1 + \ldots\ldots + \frac{a_{1n}}{c_{1n}} I(x_n)\, x_n = 0$$

$$\frac{a_{n1}}{c_{n1}} I(x_1)\, x_1 + \ldots\ldots + \frac{a_{nn}}{c_{nn}} I(x_n)\, x_n = 0$$

Soit le système rationnel :

$$\frac{a_{11}}{c_{11}} x'_1 + \ldots\ldots \frac{a_{1n}}{c_{1n}} x'_n = 0$$

$$\frac{a_{n1}}{cn_1} x'_1 + \ldots\ldots + \frac{a_{nn}}{c_{nn}} x'_n = 0$$

ou $x'_i = I(i)\, x_i$

et $I(n) = 1$

Les calculs peuvent donc être faits sous forme exacte, à l'aide d'un bloc d'algèbre Rotenberg.

b) Supposons le système non dégénéré (1 ligne nulle après triangularisation)

La résolution du système se fait par rapport à la dernière colonne ou ce qui est équivalent se fait en posant $x'_n = -1$. On obtient successivement les solutions non normées :

$$\begin{array}{lll} x'_1 = \alpha_1 & & x''_1 = x'_1/I \ (1) \\ \vdots & \text{et} & \vdots \\ & & x''_i = x'_i/I \ (i) \\ \vdots & & \vdots \\ x'_n = -1 & & x''_n = -1 \end{array}$$

La norme de la solution obtenue est donnée par

$$1 + \frac{x'^2_1}{I^2_1} + \frac{x'^2_2}{I^2_2} + \ldots\ldots + \frac{x'^2_{n-1}}{I^2_{n-1}} = k$$

D'où la solution définitive :

$$\begin{array}{l} x_1 = \dfrac{x'_1}{I_1\sqrt{k}} \\ \vdots \\ x_i = \dfrac{x'_i}{I_i\sqrt{k}} \\ \vdots \\ x_n = \dfrac{-1}{\sqrt{k}} \end{array}$$

c) Supposons le système dégénéré

D'après ce qui précède le seul problème pour pouvoir mener les calculs sous forme exacte est de s'assurer que la recherche des p solutions ne mélange pas les irrationnalités.

Supposons qu'on ait déterminé la lère solutions $x_1 = \dfrac{x'_1}{I_1\sqrt{k}} = \dfrac{\alpha_1}{I_1\sqrt{k}}$

$$\vdots$$

$$x_{n-k+1} = \frac{x'_{n-k+1}}{I_{n-k+1}\sqrt{k}} = \frac{\alpha_{n-k+1}}{I_{n-k+1}\sqrt{k}}$$

$$\vdots$$

0

où les $\alpha_i = \dfrac{a_i}{c_i}$

L'équation exprimant l'orthogonalité de la solution trouvée avec les autres s'écrit :

$$\frac{\alpha_1}{I_1\sqrt{k}} x_1 + \frac{\alpha_2}{I_2\sqrt{k}} x_2 + \cdots + \frac{\alpha_{n-k+1}}{I_{n-k+1}\sqrt{k}} x_{n-k+1} + 0 \cdots = 0$$

ou encore en remplaçant les x_i par leur expression en fonction des x'_i

$$\frac{\alpha_1}{I_1\sqrt{k}} \times \frac{x'_1}{I_1\sqrt{k}} + \frac{\alpha_2}{I_2\sqrt{k}} \frac{x'_2}{I_2\sqrt{k}} + \ldots\ldots + = 0$$

Soit $$\frac{\alpha_1}{I_1^2\sqrt{k}} x''_1 + \frac{\alpha_2}{I_2^2\sqrt{k}} x'_2 + \ldots\ldots + \frac{\alpha_{n-k+1}}{I_{n-k+1}^2\sqrt{k}} x'_{n-k+1} + 0.. = 0$$

Sachant que α_i est rationnel et de la forme $\frac{a_i}{c_i}$, que $I_i^2 \equiv (\sqrt{k})^2$ est rationnel, l'équation ajoutée conserve le système rationnel.

$$\frac{a_1}{c_1} x'_1 + \ldots + \frac{a_{n-k+1}}{c_{n-k+1}} x'_{n-k+1} = 0$$

Comme on l'a signalé dans le chapitre II la méthode des déterminations arbitraires des solutions dégénérées ne mélange pas les irrationnalités. Cependant, l'expérience prouve que le gros défaut de ce procédé est que les intermédiaires de calcul peuvent devenir très grands, de même que les solutions, et rendent le système insoluble.

4°) Calculs sous forme exacte par un bloc d'"algèbre Rotenberg" double précision entière

a) Représentation des nombres en machine

- les mots machine UNIVAC sont composés de 36 bits dont un bit de signe et le plus grand entier représenté en machine est donc $2^{35} - 1$ soit environ 10^{10}.

- les nombres réels (virgule flottante) sont caractérisés par leur mantisse et leur exposant.

Les 36 bits sont répartis en un bit de signe
8 bits pour la puissance
27 bits pour la mantisse

Les 27bits de la mantisse entrainent que la précision maximale d'un nombre flottant décimal est de 8 chiffres significatifs. Si les opérations sur de tels nombres ne font intervenir que des résultats intermédiaires inférieurs à 10^8 on n'a perdu aucune précision.

- les nombres réels double précision sont représentés par 2 mots machine. Le nombre de bits réservé à la mantisse correspond à 17 chiffres significatifs. Les calculs D.P. sont donc équivalents à des calculs avec des nombres entiers si les résultats sont inférieurs à 10^{17}

b) Les nombres "Rotenberg"

Les nombres manipulés par le bloc d'algèbre Rotenberg sont représentés par leur décomposition en puissances des 19 premièrs nombres premiers 2, 3, 5, 7.....67 et une partie non décomposable rationnelle.

$$2^{\alpha_1}.....67^{\alpha_{19}}\left[\frac{\alpha_{20}}{\alpha_{21}}\right]$$

Un nombre "Rotenberg" est donc défini par 21 variables $\alpha(1)..... \alpha(21)$ ou α_{20} et α_{21} représentent la partie non décomposable. En général, les parties non décomposées d'un nombre $\frac{\alpha_{20}}{\alpha_{21}}$ sont des entiers simples (donc $<10^{10}$) sauf dans certaines parties du programme ou α_{20} et α_{21} sont des "entiers D.P." (donc $<10^{17}$).

La différence essentielle entre le bloc d'algèbre Rotenberg de CLEGA 1 et le bloc d'algèbre Rotenberg D.P. de CLEGA 2 est que d'une part les nombres peuvent avoir une partie non décomposée au dénominateur et que d'autre part des tests continuels de dépassement de capacité doivent être faits. Le meilleur exemple est peut être l'organigramme de l'addition "Rotenberg" donné un peu plus loin, sous une forme d'ailleurs très schématique.

La présence du dénominateur α_{21} a nécessité également un programme spécial d'extraction des racines carrées.

Considérons par exemple le calcul de la norme $K = 1 + \sum_i \left(\frac{a_i}{c_i}\right)^2$ et de $\sqrt{K}$ explicitée précédemment. K est rationnel et $\sqrt{K}$ d'irrationnalité maximale en racine carrée.

Supposons que le résultat de K soit $K = 2^{\alpha_1} \ldots\ldots\ldots 67^{\alpha_{19}} \; P/Q$

on a alors $K = 2^{\alpha_1/2} \ldots\ldots\ldots 67^{\alpha_{19}/2} \sqrt{P/Q}$

2 cas peuvent se présenter :

- P/Q n'est pas un carré parfait. On conserve en mémoire la forme $\sqrt{P/Q}$ et on s'en rappelle au moment du calcul des racines.
- P/Q est un carré parfait $= \frac{p^2}{q^2}$ et il faut savoir extraire p et q

c'est-à-dire trouver une méthode d'extraction des racines carrées entières programmable .

<u>La méthode utilisée est celle dite des"nombres impairs"</u>. Elle est décrite dans le livre de Durand (1961).

On sait que $\sum_{q=1}^{n} (2q - 1) = 1 + 3 + 5 \ldots + (2n - 1) = n^2$ (1)

De là on extrait une méthode pratique pour la programmation.

Supposons qu'on veuille extraire la racine carrée d'un nombre écrit en base 10. On sépare le nombre en tranches de deux chiffres à partir de la droite. Dans la première zone à droite on retranche autant de fois qu'on le peut les termes successifs de la suite (1).

On place le reste à gauche de la deuxième zone. Pour cette zone et les suivantes on retranche les termes de la suite $10 (m + 1) + (1,3,5,7,\ldots.)$, le nombre m étant le dernier nombre retranché dans la colonne précédente.

Si le carré est parfait le reste final est zéro. Le résultat est pour chaque zone le nombre de retranchements qu'on a pu faire. L'ensemble de ces nombres écrits de gauche à droite donne la racine cherchée.

Quand on ne peut rien retrancher d'une zone on l'inscrit à gauche de la colonne précédente et on retranche alors les termes de la suite $100\,(m+1) + (1,3,5,7,\ldots)$ et d'une façon générale si pour q zones consécutives on ne peut rien retrancher, on retranche $10^{q+1}\,(m+1) + (1,3,5,\ldots)$

Exemple : $\sqrt{9'0\ 1'2\ 0'0\ 4}$

	9	01	20	04	
-1		- 60	01		
	8	60	03		
-3		- 60	03		
	5		0		
-5					
	0				soit $\sqrt{9012004} = 3002$
Nombre de retranch^{ts}	3	0	0	2	

Cette méthode est particulièrement pratique pour des nombres écrits en binaire puisqu'on ne peut retrancher qu'une fois au maximum.

Ex : 1 ' 00 ' 01 ' 11 ' 00 ' 11 ' 00 ' 01 = 18225 en binaire $_{(10)}$

-1								
0	00	01	' 11	' 00	' 11			
		- 1	00	00	01			
		0	11	00	10	00		
	-		10	00	01	01		
			1	00	00	11	01	
		-	1	00	00	11	01	
								0

1 0 0 0 0 1 1 1 = 135_{10} en binaire

Soit $\sqrt{18225} = 135$

En conséquence, nous avons programmé directement en langage machine la fonction NSQRT (N) afin de profiter pleinement du calcul binaire.

III. Ecriture du programme CLEGA 2

1°) Description générale

Le programme CLEGA 2 est écrit en Fortran V UNIVAC, à l'exception de la fonction NSQRT qui est écrite en langage machine, et il compte environ 2500 ordres. Il n'y a pas ici de problèmes de décodage des données, de codage des opérations ou de difficultés d'avancement des variables et l'organisation générale des calculs est relativement simple.
On peut voir sur l'organigramme du programme principal les principales phases du traitement des systèmes. On commance par une tabulation des puissances des nombres premiers qui permet d'accélérer les calculs du bloc d'algèbre Rotenberg."COUPE" est le principal sous-programme interne. Il lit sur le fichier d'entrée les différents systèmes à résoudre et les décompose, s'il y a lieu, en sous-systèmes indépendants. Il constitue alors un nouveau fichier directement exploitable pour la suite du programme; en particulier les sous-systèmes sont triangularisables et solubles sans problème dans la plupart des cas, c'est-à-dire qu'ils ne sont pas singuliers dans le cas général. L'organigramme de COUPE est donné et commenté un peu plus loin. Le contrôle est rendu au programme principal qui lit le tampon de tête du nouveau fichier. Une grande boucle commence sur le nombre total de systèmes. Pour un système donné le programme lit le nombre de pléthysmes symétriques et antisymétriques c'est-à-dire le nombre de relations $x_i = \pm x_j$ que l'on veut imposer aux inconnues du système. Ces relations diminuent l'ordre du système à résoudre et permettent de séparer en deux systèmes distincts les cas des représentations symétriques et antisymétriques. Le programme range les données nécessaires concernant les pléthysmes.

Une deuxième boucle, interne à la précédente, commence sur le nombre de sous-systèmes. Pour un sous-système donné, le programme lit sur le fichier les éléments du sous-système traité, puis il examine si parmi les relations $x_i = \pm x_j$ certaines concernent des numéros de vecteurs du sous-système. Si c'est oui, il prépare les transformations nécessaires. Une troisième boucle interne aux deux précédentes commence sur le nombre d'éléments du sous-système. Les éléments sont rangés sous forme a $\sqrt{b}$/c dans le tableau à une dimension SYS (K) et si Ø est l'ordre du sous-système, l'adresse d'un élément correspondant à la ligne I et la colonne J est donnée par la fonction

$$K = 3Ø\ (I - 1) + 3\ (J - 1) + 1$$

c'est-à-dire qu'on trouve dans SYS (K), (K+1), (K+2) les valeurs a, b, c. En effet, dans tout le programme nous avons utilisé exclusivement pour ranger les éléments des systèmes des tableaux à 1 dimension dont le calcul d'adresses est plus rapide et qui permettent de perdre moins de place en mémoire dans le cas des éléments nuls. Ainsi on utilise dans la suite le tableau COEROT (K) où sont rangés tous les coefficients sous forme Rotenberg. Un tableau d'adresses associé à COEROT permet de connaître à tout moment l'adresse dans COEROT d'un élément a_{ij} . Si on veut permuter les éléments d'une ligne ou d'une colonne, seul le tableau d'adresses change, les éléments eux-mêmes ne bougent pas. Lorsque la boucle sur les éléments est terminée, le sous-système initial est rangé dans SYS. Il est alors édité sur papier. Le programme appelle ensuite le sous-programme externe RATION qui rationnalise le sous-système obtenu et range les irrationnalités des différentes inconnues par rapport à la dernière. Puis, il appelle COLPLE qui réalise les opérations nécessaires entrainées par les relations $x_i = \pm x_j$. Ensuite, le sous-programme RANGE transforme les éléments sous forme Rotenberg, les range dans le tableau COEROT et détermine les tableaux d'adresses des lignes et des colonnes associés à COEROT. En même temps, il prépare la triangularisation en rangeant les numéros des lignes par ordre croissant du nombre de zéros situés en début de ligne et traite le cas particulier des sous-systèmes d'ordre 1.

Le programme principal appelle le sous-programme externe TRIANG. Celui-ci triangularise le sous-système qui, à la fin de cette transformation, est toujours rangé dans COEROT. Enfin, le programme principal appelle le sous-programme EXTRAC qui analyse le sous-système triangularisé. Il détermine d'après le nombre de lignes nulles si le sous-système est directement soluble (1 ligne nulle). Si c'est le cas, il appelle le sous-programme SOLVE qui détermine les solutions x'_i du système rationalisé ; il appelle ensuite le sous-programme RACINE qui calcule les $x''_i = x'_i/I(i)$, la norme $K = \Sigma \frac{x''^2_i}{I_i^2}$ et les $x_i = \frac{x'_i}{I_i \sqrt{k}}$. Le sous-système est alors édité.

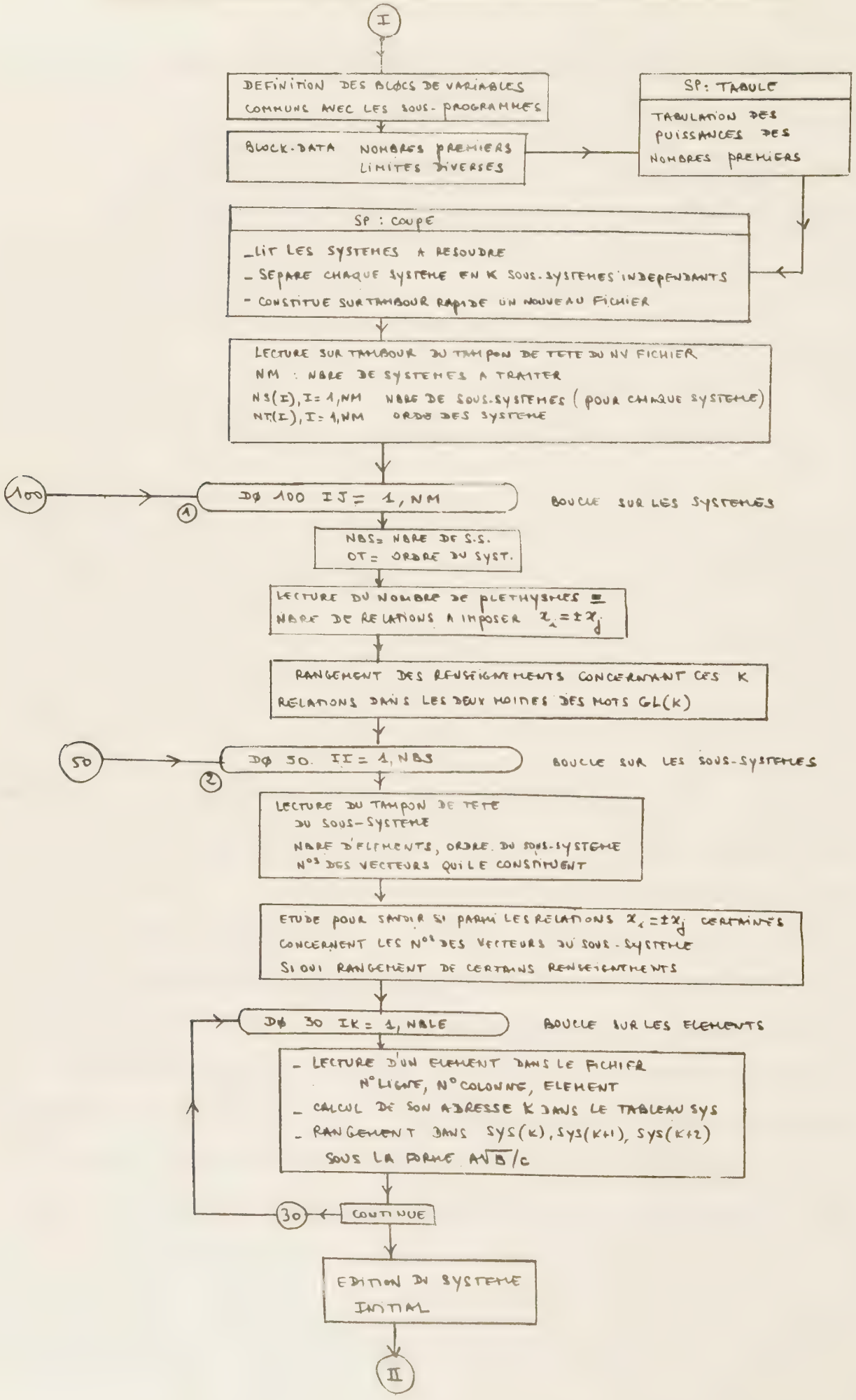
Si la boucle sur les sous-systèmes n'est pas terminée on passe au sous-système suivant. De même, lorsque la boucle des sous-systèmes est terminé on passe au système suivant.

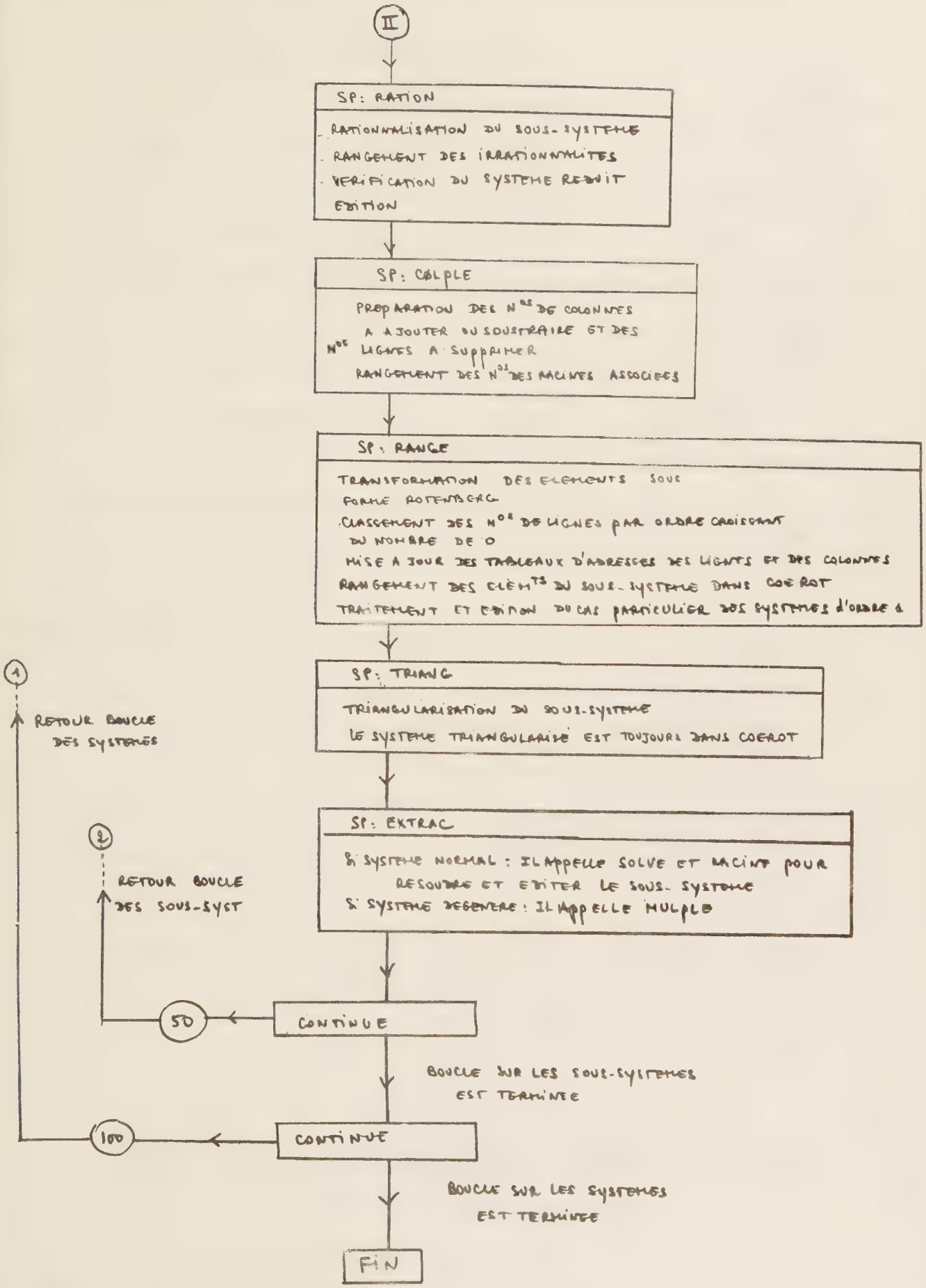
Si k lignes sont nulles EXTRAC appelle le sous-programme MULPLE dont l'organigramme montre comment il traite le cas d'un sous-système correspondant à une dégénérescence (k - 1).

Dans le cas précédent, une fois que le sous-système est résolu, le sous-système initial triangularisé rangé dans COEROT est détruit. C'est sans importance puisqu'on traite le système suivant.

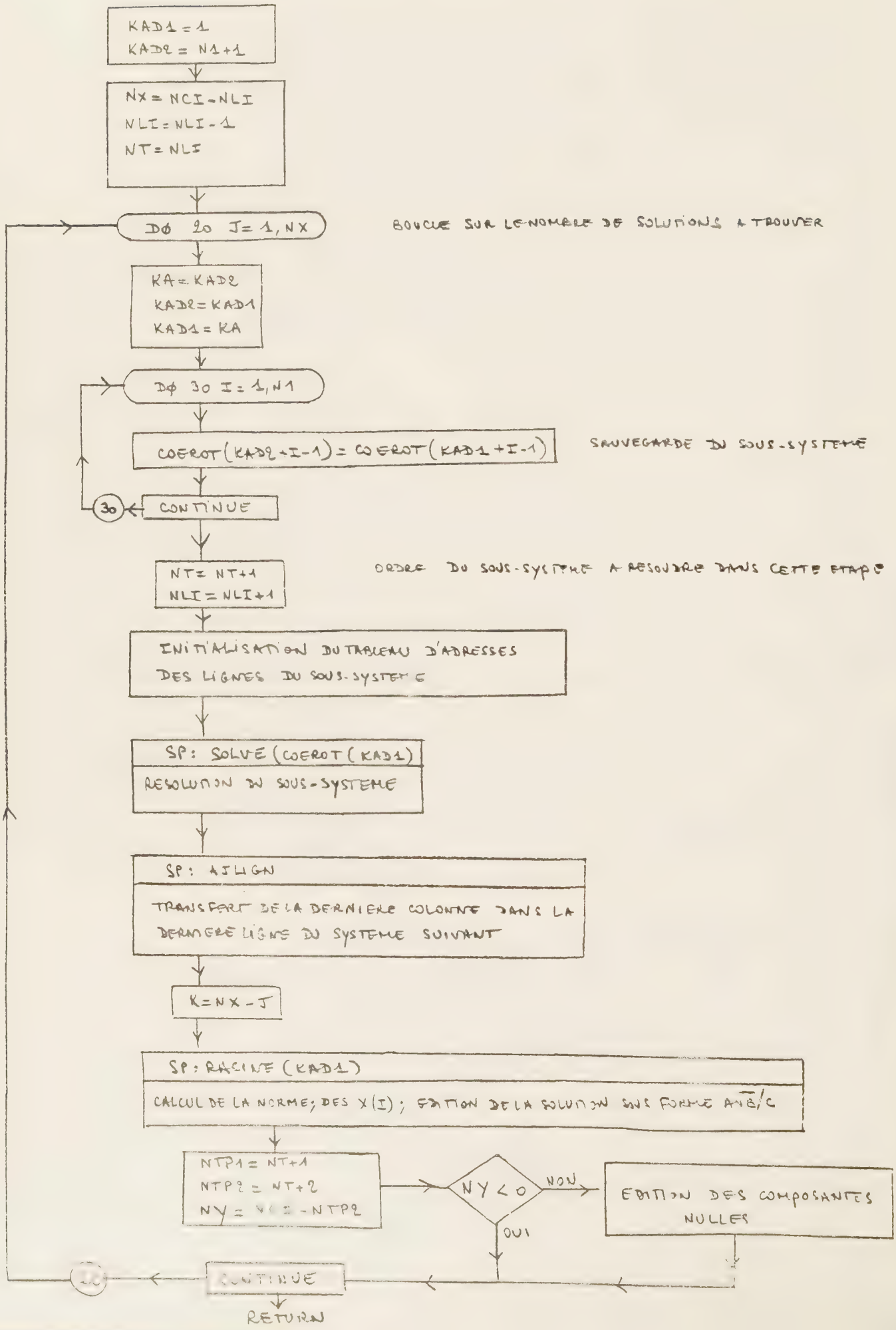
Le cas d'un sous-système dégénéré est différent. On a besoin de le résoudre plusieurs fois pour déterminer les k solutions orthogonales. Comme la résolution détruit le système initial il faut le sauvegarder. Ceci est réalisé de la façon suivante. Le tableau COEROT est divisé en deux zones contenant chacune le système triangularisé. Après chaque résolution on ajoute l'équation supplémentaire déterminée au système de la zone qui n'a pas servi et après sauvegarde du nouveau système on traite la solution suivante.

ORGANIGRAMME SCHEMATIQUE DE L'ORGANISATION DU PROGRAMME PRINCIPAL CLEGA2




II
SP: RATION
- RATIONNALISATION DU SOUS-SYSTEME
- RANGEMENT DES IRRATIONNALITES
- VERIFICATION DU SYSTEME REDUIT
EDITION
SP: CALPLE
PREPARATION DES N°S DE COLONNES A AJOUTER OU SOUSTRAIRE ET DES N°S LIGNES A SUPPRIMER
RANGEMENT DES N°S DES RACINES ASSOCIEES
SP: RANGE
TRANSFORMATION DES ELEMENTS SOUS FORME ROTENBERG
CLASSEMENT DES N°S DE LIGNES PAR ORDRE CROISSANT DU NOMBRE DE 0
MISE A JOUR DES TABLEAUX D'ADRESSES DES LIGNES ET DES COLONNES
RANGEMENT DES ELEMTS DU SOUS-SYSTEME DANS COEROT
TRAITEMENT ET EDITION DU CAS PARTICULIER DES SYSTEMES D'ORDRE 1
1
RETOUR BOUCLE DES SYSTEMES
SP: TRIANG
TRIANGULARISATION DU SOUS-SYSTEME
LE SYSTEME TRIANGULARISE EST TOUJOURS DANS COEROT
2
RETOUR BOUCLE DES SOUS-SYST
SP: EXTRAC
SI SYSTEME NORMAL : IL APPELLE SOLVE ET RACINT POUR RESOUDRE ET EDITER LE SOUS-SYSTEME
SI SYSTEME DEGENERE : IL APPELLE MULPLE
50
CONTINUE
BOUCLE SUR LES SOUS-SYSTEMES EST TERMINEE
100
CONTINUE
BOUCLE SUR LES SYSTEMES EST TERMINEE
FIN

SOUS-PROGRAMME MULPLE : TRAITEMENT DES SYSTEMES DEGENERES



3°) Description du sous-programme "COUPE"

L'organigramme suivant est celui du sous-programme "COUPE", interne au programme principal. Le role de "COUPE" est de constituer, à partir du fichier initial de systèmes construits par CLEGA 1, un nouveau fichier dans lequel les systèmes sont séparés en leurs sous-systèmes indépendants. Les commentaires sont écrits à droite des ordres ou des groupes d'ordres.
Un mot machine est constitué de 36 bits, numérotés de gauche à droite de 0 à 35, contenant chacun 1'information 0 ou 1. En général, les ordres FORTRAN définissent des opérations sur des mots machine complets. Cependant, il existe une fonction très commode FLD (I,J,K) en FORTRAN V UNIVAC qui permet toute manipulation sur les bits d'un mot, et un ensemble de fonctions logiques telles que AND (I,J) et OR (I,J) qui effectuent un certain nombre d'opérations binaires.
Ainsi dans 1'organigramme de "COUPE" 1'ordre FLD (NC - 1, 1, NOM (NL)) = 1 a pour effet de mettre à 1 le (NC - 1)^{ème} bit du mot NOM (NL) ; considérons les ordres U = AND (MOT, NOM (K))
et V = OR (MOT, NOM (K))
La fonction AND met des 1 dans les bits du mot U si les 2 bits correspondants de même rang de MOT et NOM (K) sont égaux à 1.
La fonction OR met des 1 dans les bits du mot V si 1'un ou 1'autre des bits de même rang de MOT ou NOM (K) sont égaux à 1.

Supposons : MOT = 0110101.....
NOM(K) = 1100111.....

U = AND ( ) = 0100101.....
V = OR ( ) = 1110111.....

Le principe général de 1'extraction des sous-systèmes est le suivant :

Le fichier de départ est constitué par les systèmes à traiter dont les éléments non nuls sont donnés à la suite, par numéro de ligne et de colonne croissant, sous la forme

n° de ligne, n° de colonne, élément $N1\sqrt{N2}/N3$

NL, NC, N1, N2, N3

On associe à chaque n° de ligne NL un mot NOM (NL) dont initialement tous les bits sont nuls.

Le sous-programme lit un système d'ordre n du fichier de départ. Lorsqu'il rencontre un élément non nul NL, NC, N1, N2, N3 il met à 1 le $(NC - 1)^{ème}$ bit du mot NOM (NL).

Une fois tout le système lu on dispose de K mots NOM (NL) non nuls, correspondant à toutes les lignes dont les numéros sont apparus au moins une fois et possédant un 1 dans les bits repérant les numéros de colonnes des éléments non nuls.

Les systèmes sont symétriques donc les lignes j qui n'apparaissent pas doivent être considérées comme autant de sous-systèmes à 1 ligne et 1 colonne.

L'étape suivante consiste à chercher à quel sous-système chaque vecteur appartient. Initialement la liste de vecteurs non classés est la liste de tous les vecteurs du système. On met dans MOT le nom associé au premier vecteur de la liste et on cherche les numéros des vecteurs qui forment avec lui un sous-système indépendant. La fonction AND (MOT, NOM (K)) détermine les numéros de vecteurs qui ont au moins un numéro de colonne en commun avec MOT et la fonction OR (MOT, NOM (K)) permet de trouver tous les numéros des colonnes qui interviennent, donc tous les numéros des vecteurs qui appartiennent au même sous-système que le premier vecteur de la liste des non-classés.

Au cours de cette étape on détermine les vecteurs non classés restant qui forment alors la prochaine liste à étudier. A la fin du traitement de chaque liste intermédiaire obtenue, un sous-système est déterminé par la liste des numéros des vecteurs qui le constitue.

Dans l'étape finale le fichier des éléments et les renseignements précédents sur les sous-systèmes permettent d'assigner à chaque élément son numéro de ligne et de colonne dans le sous-système auquel il appartient et de stocker dans l'ordre les éléments de chaque sous-système qui est alors prêt à être résolu.

IV. Conclusion

La description du programme CLEGA 2 n'est bien sûr pas complète. Cependant, elle donne un aperçu sur la façon dont le programme est conçu. Nous n'avons pas parlé par exemple de la possibilité de permuter les colonnes par l'intermédiaire de cartes données. Cependant, c'est un point essentiel pour deux raisons :

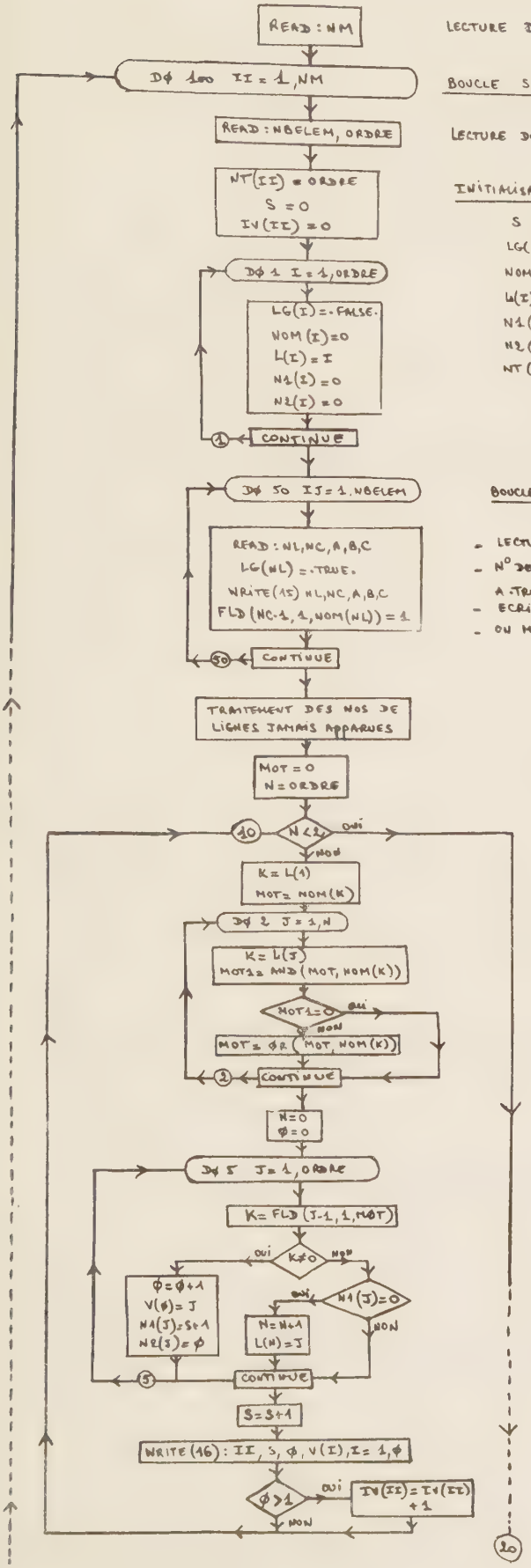
a) on a vu que le sous-système traité est résolu par rapport à la dernière colonne n (ou n - p pour un système dégénéré). Or, si le système est tel qu'on a $x_n = 0$, le système devient insoluble. Il faut le résoudre par rapport à une autre colonne.

b) on a signalé que les intermédiaires de calculs et les solutions peuvent devenir très complexes dans le cas des systèmes dégénérés. Il faut donc pouvoir permuter les colonnes de façon à essayer les différents cas d'annulation des x_i.

C'est d'autant plus indispensable qu'on peut facilement avec la méthode $x_n=x_{n-1}=\ldots=0$ forcer des annulations incompatibles avec le système qui devient alors singulier. Remarquons qu'au lieu d'annuler des x_i on peut aussi égaler s'il y en a des $x_i = x_k$ de même irrationnalité.

Les systèmes traités par CLEGA 2 pour les besoins de notre travail ont montré que le programme peut résoudre des systèmes non dégénéré d'ordre supérieur à 20. Les seuls cas insolubles sont des systèmes d'ordre $\simeq 20$ plusieurs fois dégénérés ($SO_5 \supset R_3$) et des améliorations seraient nécessaires au niveau du bloc calcul pour étendre les performances.

SOUS-PROGRAMME COUPE : CONSTRUCTION, A PARTIR DU FICHIER INITIAL DE SYSTEMES CONSTITUES PAR CLEGAL, DU FICHIER DE SOUS-SYSTEMES INDEPENDANTS RESOLVABLES PAR LE PROGRAMME CLEGAL



LECTURE DU NOMBRE DE SYSTEMES ENREGISTRES A TRAITER

BOUCLE SUR LE NOMBRE DE SYSTEMES ; INDICE COURANT : II

LECTURE DU NOMBRE D'ELEMENTS ET DE L'ORDRE DU SYSTEME TRAITE

INITIALISATION DES VARIABLES

S : NOMBRE ENTIER QUI REPERE LES NUMEROS DES SOUS-SYSTEMES (S.S.)
LG(I) : VARIABLE LOGIQUE ASSOCIEE A CHAQUE NUMERO DE LIGNE
NOM(I) : MOT ENTIER ASSOCIE A CHAQUE LIGNE
L(I) : LISTE INITIALE DES VECTEURS NON ENCORE CLASSES DANS UN (S.S.)
N1(I) : STOCKE POUR CHAQUE N° DE LIGNE LE N° DU S.S. AUQUEL ELLE APPARTIENT
N2(I) : REPERE LE NUMERO QU'A LA LIGNE I DU SYST, DANS LE SOUS-SYSTEME.
NT(II) : ORDRE DU SYSTEME TOTAL

BOUCLE SUR LES ELEMENTS A LIRE ; INDICE COURANT : IJ

- LECTURE DE L'ELEMENT
- N° DE LIGNE NL RENCONTRE AU MOINS UNE FOIS - ON MET VARIABLE LOGIQUE ASSOCIEE A .TRUE.
- ECRITURE SUR TAMBOUR RAPIDE (15) DE L'ELEMENT
- ON MET A 1 LE $(NC-1)^{EME}$ BIT DU MOT NOM(NL) ASSOCIE A LA LIGNE NL

INITIALISATION DES VARIABLES DE CONSTITUTION DES LISTES DES NUMEROS DE VECTEURS CONSTITUANT LES SOUS-SYSTEMES (S.S.)

TEST SUR LE NOMBRE DE VECTEURS RESTANT A CLASSER DANS UN S.S.

ON MET DANS MOT LE NOM(k) ASSOCIE AU PREMIER N° DE VECTEUR DE LA LISTE DES VECTEURS NON CLASSES EN COURS D'EXPLORATION.

BOUCLE J SUR LA LISTE INITIALEMENT DES N°S DE VECTEURS NON CLASSES

ON FAIT LE PRODUIT LOGIQUE "AND" BIT A BIT DES ELEMENTS DE LA LISTE

- SI MOT1 = 0 PAS DE N° DE COLONNES EN COMMUN ; K N'EST PAS UN NUMERO DE VECTEURS FAISANT PARTIE DU S.S. EN COURS DE DETERMINATION - ON TRAITE CAS DU VECTEUR SUIVANT
- SI MOT1 ≠ 0 LE PRODUIT "OR", BIT A BIT, DETERMINE LES NOS DES VECTEURS FAISANT PARTIE DU SOUS-SYSTEME. ILS SONT DONNES PAR LES BITS EGAUX A 1 DE MOT QUI SONT CEUX QUI APPARAISSENT AU MOINS UNE FOIS DANS L'UN DES NOM(K)

BOUCLE SUR LES BITS DE "MOT". IL Y EN A ORDRE DE SIGNIFICATIFS

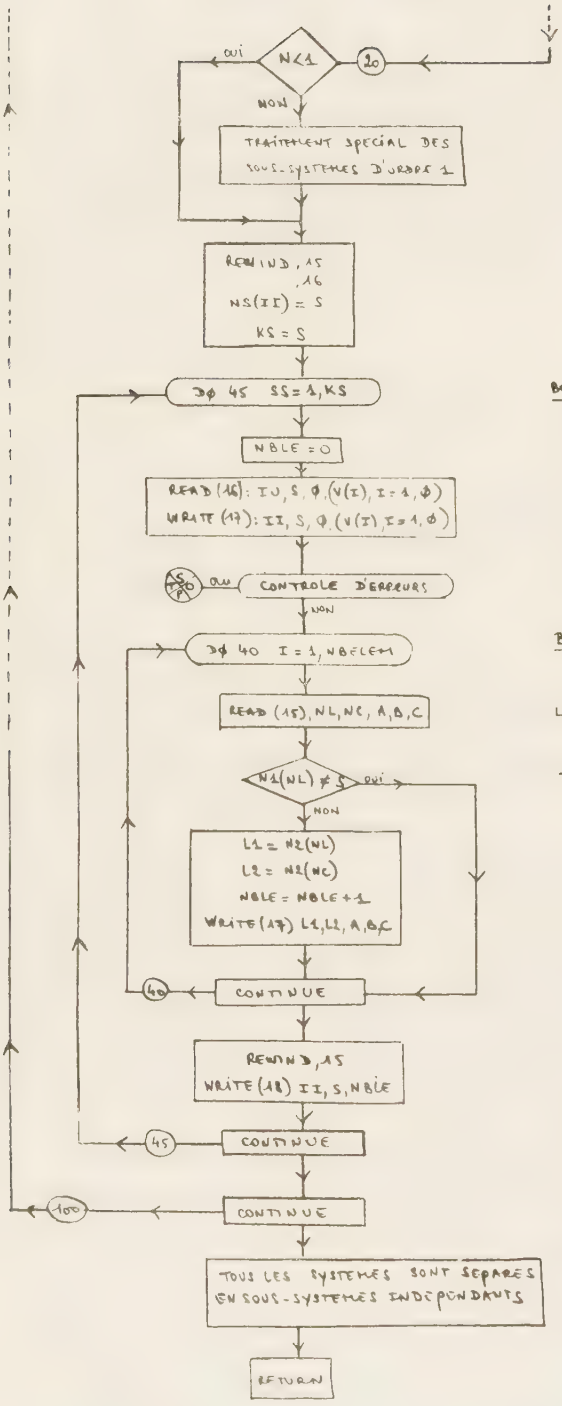
K = 0 OU 1 SUIVANT QUE LE $(J-1)^{EME}$ BIT DE MOT EST NUL OU PAS

- SI K=0 VECTEUR J NE FAIT PAS PARTIE DU S.S. EN COURS
  SI N1(J) = 0 VECTEUR J NE FAIT PAS PARTIE DES S.S. PRECEDENTS DEJA DETERMINES - ON L'AJOUTE A LA PROCHAINE LISTE QUI SERA TRAITEE
- SI K≠0 ON A TROUVE VECTEUR J QUI APPARTIENT AU S.S. EN COURS

LA BOUCLE SUR LES BITS DU MOT "MOT" EST TERMINEE
ON A TROUVE LE S-EME SOUS-SYSTEME DU SYSTEME II

ECRITURE SUR TAMBOUR 16 : N° DU SYST., N° DE S.S., ORDRE DU S.S. N°S DES VECTEURS
SI ORDRE DU S.S. EST > 1 COMPTEUR DE S.S. A RESOUDRE EST INCREMENTE DE 1

ON REPART A L'ORDRE (10) POUR TESTER S'IL Y A ENCORE UNE LISTE EN ATTENTE DE VECTEURS A ORIENTER DANS UN S.S.
SINON ON CONTINUE ET ON VA A L'ORDRE (20) (p. suivante)



- Si N<1 PAS DE VECTEURS NON CLASSES
- Si N=1 IL RESTE UN VECTEUR DANS LA DERNIERE LISTE ON CONSTITUE UN S.S. D'ORDRE 1

ON CONNAIT MAINTENANT LES N°S DES VECTEURS APPARTENANT AUX DIVERS SOUS-SYSTEMES INDEPENDANTS - CES RENSEIGNEMENTS ONT ETE STOCKES SUR TAMBOUR (16) .

LES ELEMENTS EUX-MEMES SONT SUR TAMBOUR (15) MAIS SONT ENCORE REPERES PAR LEUR N° DE LIGNE ET COLONNE DANS GRAND SYSTEME .

LA SUITE DU SOUS-PROG COUPE CONSISTE A ASSIGNER A CHAQUE ELEMENT SON N° DE LIGNE ET COLONNE DANS LE SOUS-SYSTEME DONT IL FAIT PARTIE ET A STOCKER DANS L'ORDRE LES ELEMENTS DE CHAQUE SOUS-SYSTEME .

BOUCLE SUR LE NOMBRE DE SOUS-SYSTEMES

NBLE = COMPTEUR DE NBRE D'ELEMENTS DU SOUS-SYSTEME EN COURS

LECTURE ET ECRITURE DES RENSEIGNEMENTS CONCERNANT LE SOUS-SYSTEME

BOUCLE SUR LE NBRE TOTAL D'ELEMENTS DU SYSTEME

LECTURE DU PROCHAIN ELEMENT

TEST: FAIT IL PARTIE DU SOUS-SYSTEME CONSIDERE ?

SI - NON - ON PASSE A L'ELEMENT SUIVANT
SI - OUI - ON LUI ATTRIBUE SON NUMERO DE LIGNE ET DE COLONNE DANS LE SOUS-SYSTEME
COMPTEUR D'ELEMENTS DU SOUS-SYST
ECRITURE DE L'ELEMENT DU SOUS-SYST

ON A TROUVE TOUS LES ELEMENTS DU SOUS-SYSTEME TRAITE

ECRITURE SUR TAMBOUR (18) DES RENSEIGTS SUR SOUS-SYSTEME

ON A TRAITE TOUS LES SOUS-SYSTEMES D'UN SYSTEME

ON A TRAITE TOUS LES SYSTEMES

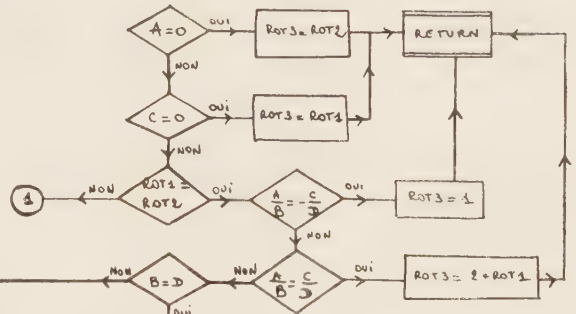
LE FICHIER DES SYSTEMES SEPARES EN SOUS-SYSTEMES EST CONSTITUE

ADDITION "ROTENBERG" DE DEUX NOMBRES [ROT1 + ROT2]

RESULTAT DANS ROT3

ROT1 ≡ (ROT1) A/B
ROT2 ≡ (ROT2) C/D
(ROT) ≡ (ROT(I), I = 1,15)

1ère PARTIE : TESTS PRELIMINAIRES TRAITANT LES CAS PARTICULIERS SIMPLES ET FREQUENTS



LES DEUX NBRES ROTENBERG NE SONT PAS PARTICULIERS → RENVOI VERS ① QUI TRAITE LE CAS GENERAL

LES DEUX NBRES ONT $\hat{M}$ PARTIE ROTENBERG ET DES PARTIES NON DECOMPOSEES QUELCONQUES

→ ON PREPARE LE CALCUL DE ROT3 = (ROT1) [A/B + C/D]

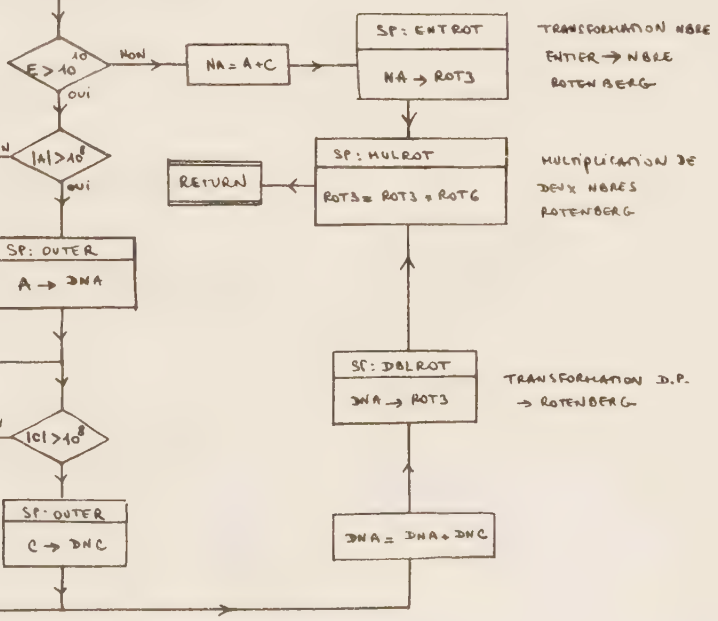
P = PGCD (A,C)
A = A/P
C = C/P
Q = PPCM (B,D)
A = (A*Q) | B
C = (C*Q) | D

ROT3 = (ROT1) A/B [A+C]
= ROT6 [A+C]

ON PREPARE : ROT3 = (ROT1) * P/Q * [A+C]
= ROT6 * [A+C]

$E_{réel} = A$, $F_{réel} = C$; E = |E+F|

TESTE POUR SAVOIR SI LE CALCUL DE [A+C] DOIT ETRE FAIT EN ENTIER OU EN DOUBLE PRECISION



A, C } SONT DES NBRES ENTIERS

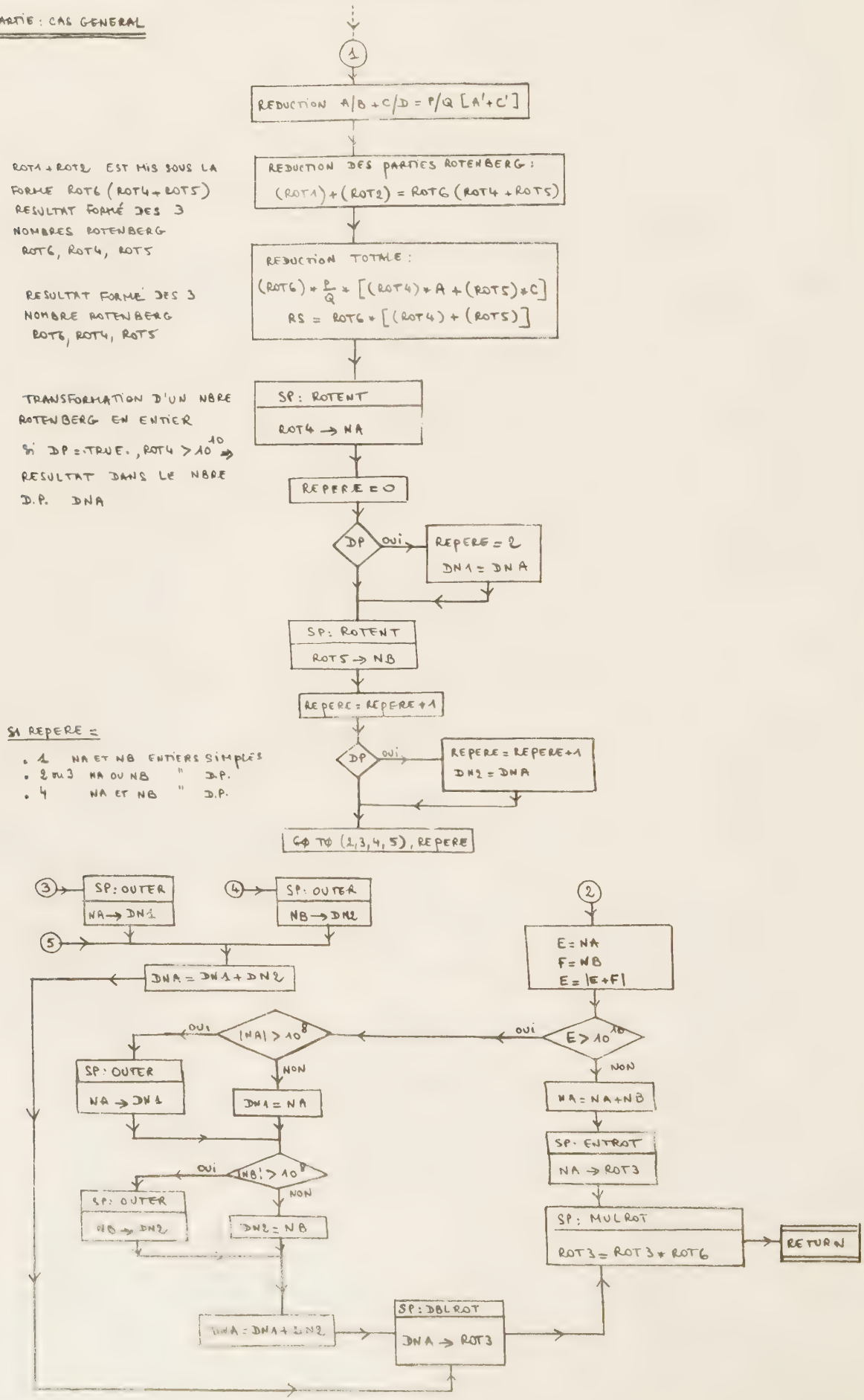
E, F } SONT DES NBRES FLOTTANTS

DNA, DNC } SONT DES NBRES D.P. QUI DOIVENT RESTER $\leq 10^{17}$

SP : OUTER TRANSFORME UN ENTIER COMPRIS ENTRE 10^8 et 10^{10} EN ENTIER DOUBLE PRECISION

ADDITION "ROTENBERG" DE DEUX NOMBRES ROT1 et ROT2 RESULTAT DANS ROT3 (SUITE)

2ème PARTIE : CAS GENERAL



SOUS-PROGRAMMES DU BLOC DE RESOLUTION : A) SP [illegible]

- SP : RATION — RATIONNALISATION DU SOUS-SYSTEME EN COURS DE TRAITEMENT

APPELLE : RAPP1, REDUC

- REDUCTION DES LIGNES SANS 0 DANS LA DERNIERE COLONNE
- RANGEMENT DES IRRATIONNALITES DANS LE TABLEAU IRR(I)
- CAS DES LIGNES SAUTEES
- VERIFICATION DU SYSTEME REDUIT
- EDITION DU SOUS-SYSTEME OBTENU

- SP : COLPLE — PREPARATION, D'APRES LA LECTURE DES DONNEES CONCERNANT LES PLETHYSMES SYMETRIQUES OU ANTISYMETRIQUES, DES NUMEROS DE COLONNES A AJOUTER OU SOUSTRAIRE ET DES NUMEROS DE LIGNES A ENLEVER, RANGEMENT DES NUMEROS DES RACINES CORRESPONDANTES (DS GRAND SYSTEME) DONT LES VALEURS SONT LIEES (RACINES ASSOCIEES) -

APPELLE : INIT1, INIT2, ADSOUS

SP : RANGE — LES ELEMENTS DU SYSTEME A RESOUDRE SONT SOUS LA FORME $A\sqrt{B}/C$ ET RANGÉS DANS LE SYSTEME SYS(K). LE SP "RANGE" FAIT TRANSFORMER LES ELEMENTS SOUS FORME ROTENBERG ET RANGE LE SYSTEME ROTENBERG DANS LE TABLEAU COEROT(I).

APPELLE : ID, INIT3, ENTROT, DIVROT, NULLE

- INITIALISATION DES ADRESSES ET DU TABLEAU COEROT
- CALCUL DU NOMBRE DE 0 EN DEBUT DE CHAQUE LIGNE (PREPARATION DE LA TRIANGULARISATION)
- RANGEMENT DES N^{OS} DES LIGNES PAR ORDRE CROISSANT DU NOMBRE DE 0
- ASSIGNATION DES NUMEROS DES LIGNES
- RANGEMENT DANS COEROT COLONNE PAR COLONNE
- CAS PARTICULIER DES SYSTEMES D'ORDRE 1 - EDITION DE LA SOLUTION NULLE X_i TROUVEE ET CONTROLE PAR LE SOUS-PROG INTERNE "PLETH" SI DES VARIABLES $\pm x_k$ LUI ETAIENT ATTACHEES.

NCTION ID(I,J)

LA VALEUR DE LA FONCTION EST L'ADRESSE DE L'ELEMENT E(I,J) DU SOUS SYSTEME RANGÉ DANS LE TABLEAU SYS(K).

SOUS-PROGRAMMES DU BLOC DE RESOLUTION : A) SP: PRINCIPAUX (SUITE)

- SP. TRIANG . TRIANGULARISATION DU SOUS-SYSTEME EN COURS.

APPELLE: A, DIVROT, MULROT, ADDROT

- TRIANGULARISATION A L'AIDE D'UNE METHODE STANDARD . ON TRAVAILLE A L'AIDE DES ADRESSES A(I,J) DES ELEMENTS DANS LE TABLEAU COEROT. LES CALCULS SONT FAITS A L'AIDE DU BLOC D'ALGEBRE ROTENBERG - LES LIGNES QUI DEVIENNENT NULLES SONT TRANSFEREES A LA FIN DU TABL (EN FAIT C'EST SEULEMENT LE TABLEAU D'ADRESSES QUI CHANGE). SI PIVOT D'UNE LIGNE EST NUL, ON ECHANGE SON ADRESSE AVEC CELLE DE LA LIGNE SUIVANTE.

- APRES TRIANGULARISATION ON A UN SYSTEME HOMOGENE DE N LIGNES ET N COLONNES DONT K LIGNES SONT NULLES

- SAUVEGARDE DU SYSTEME TRIANGULARISÉ (COEROT(I), I=1,M) DANS (COEROT(M+I), I=1,M)

- FONCTION A(I,J) LA VALEUR DE LA FONCTION EST L'ADRESSE-1 DANS LE TABLEAU COEROT DE L'ELEMENT DE LA $I^{ème}$ LIGNE ET LA $J^{ème}$ COLONNE DU SOUS-SYSTEME A RESOUDRE

- SP: EXTRAC ANALYSE LE SYSTEME TRIANGULARISÉ

APPELLE: SOLVE, RACINE, MULPLE, NULLE

SOIT K LE NOMBRE DE LIGNES NULLES

. SI K=1 : CAS NORMAL D'UN SYSTEME HOMOGENE NON DEGENERE
APPEL DU SOUS-PROG "SOLVE" DE RESOLUTION DU SYSTEME
APPEL " " "RACINE" CALCUL DE LA SOLUTION COMPLETE

. SI K>1 : CAS D'UN SYSTEME (K-1) FOIS DEGENE
APPEL DU SOUS-PROG "MULPLE"

. SI K=0 : CAS ANORMAL D'UN SYS HOMOGENE SANS LIGNE PROPORTIONNELLE
⇒ SOLUTION NULLE $X1=X2=..Xn=0$
APPEL DU SP "NULLE"

- SP: SOLVE(COEROT): RESOLUTION DES SYSTEMES TRIANGULARISES
+ CE MYEAN SI LE SYSTEME EST SINGULIER DIAGNOSTIC ET SOLUTION NULLE $x_1=x_2=..=0$
APRES RESOLUTION LA SOLUTION SE TROUVE DANS LA DERNIERE COLONNE
APPELLE: A, PERM, DIVROT, REMIS1, MULROT, ADDROT, REMISO

- SP. RACINE (KAD1) : CALCUL DE LA SOLUTION COMPLETE DU SOUS-SYSTEME TRAITÉ ET EDITION DES RESULTATS

APPELLE: A, REMISO, ENTROT, REMIS1, ROTPUI, DIVROT, MULROT, ADDROT, ROTRAC

SOIT X(I) LES N RACINES TROUVEES PAR SOLVE (SOUS FORME ROTENBERG ET RANGEES DANS LE TABLEAU COEROT).
SOIT IRR(I) L'IRRATIONNALITE DE X(I)

. CALCUL DES X(I) = X(I) / IRR(I)

SOUS-PROGRAMMES DU BLOC DE RESOLUTION : A) SP PRINCIPAUX (suite)

SP: RACINE (KAD1) (suite)

- $K = \sum [X(I)]^2$ (ROTENBERG)
- TRAITEMENT DE LA DERNIERE COMPOSANTE
- CALCUL DES $X(I) = X(I)/\sqrt{K}$ (ROTENBERG) ET RECHERCHE DES RACINES ATTACHÉES.
- TRANSFORMATION EN $A\sqrt{B}/C$ ET EDITION DE LA SOLUTION DU SOUS-SYSTEME

SP : MULPLE — TRAITEMENT DES RACINES MULTIPLES

APPELLE : A, INIT4, SOLVE, RACINE, NULLE, ENTROT, DIVROT, REMIS1, REMIS0

① • APPEL DU SP "TRANSF" : SAUVEGARDE DU SYSTEME COEROT (ADRESSE1) DANS COEROT (ADRESSE2)

Soit K LE NOMBRE DE LIGNES NULLES APRES TRIANGULARISATION

- MISE A ZERO DES (K-1) DERNIERES COMPOSANTES
- SYSTEME A RESOUDRE EST CELUI DEFINI PAR LES N-(K-1) PREMIERES COLONNES ET LES N-(K-2) PREMIERES LIGNES
- INITIALISATION COEROT (ADRESS01)
- APPEL DU SP "SOLVE" RESOLUTION DU SYSTEME
- APPEL DU SP INTERNE "AJLIGN" QUI AJOUTE L'EQUATION CORRESPONDANT A LA SOLUTION OBTENUE, AU SYSTEME COEROT MIS EN RESERVE
- APPEL RACINE (KAD1) - EDITION DES RACINES CALCULEES
- EDITION DES COMPOSANTES NULLES - FIN DE LA 1ERE SOLUTION
- ECHANGE DES ADRESSES : ADRESSE1 ET ADRESSE2

SI K=1 FIN SINON R=K-1 ET ON RECOMMENCE A L'ORDRE 1

SOUS-PROGRAMMES DU BLOC DE RESOLUTION : B) PETITS SOUS-PROGRAMMES ANNEXES

- SP: RAPP1(NX,NY,NZ) CALCULE LE RAPPORT DE 2 NBRES NX et NY DE LA FORME $A\sqrt{B}/C$
  APPELLE : REDUC
- SP: RAPP2 (NX,NY,NZ) CALCULE LE RAPPORT DE DEUX NBRES NX ET NY DE MEME IRRATIONNA
- SP: REMIS1(ROT) INITIALISATION A 1 D'UN NOMBRE ROTENBERG
- SP: REMIS0(ROT) " 0 "
- SP: INIT1 (N) INITIALISATION DES VARIABLES REPERANT LES LIGNES A SUPPRIMER
- SP: INIT2(N) " " " " COLONNES " "
- SP: INIT3 (COEROT) INITIALISATION DU TABLEAU COEROT
- SP: INIT4 (COEROT) " " TABLEAU D'ADRESSES DES LIGNES DANS COEROT
- SP: PERM(I,K) PERMUTATION DES ADRESSES DE DEUX LIGNES
- SP: ADSOUS (J1, J2) ADDITION OU SOUSTRACTION DE DEUX COLONNES J1 ET J2 DE MEM
  IRRATIONNALITE

BLOC D'ALGEBRE ROTENBERG

LISTE DES SOUS-PROGRAMMES ET DE LEUR FONCTION

SP: ADDROT (ROT1, ROT2, ROT3) — ADDITION DE DEUX NOMBRES ROTENBERG

APPELLE LES SP : PGCD, PPCM, ENTROT, MULROT, DUTGR, DBLROT, ROTENT

(VOIR ORGANIGRAMME)

SP: MULROT (ROT1, ROT2, ROT3) — MULTIPLICATION DE DEUX NBRES ROTENBERG $\left(ROT1 \times \frac{A}{B}\right) \times \left(ROT2 \times \frac{C}{D}\right)$

APPELLE LE SP : REDUC

ROT3 (I) = ROT1 (I) + ROT2 (I)
REDUC $\left(\frac{A}{D}\right)$; REDUC $\left(\frac{C}{B}\right)$
RESULTAT : ROT3 $\times \frac{AC}{BD}$

SP: DIVROT (ROT1, ROT2, ROT3) — DIVISION DE DEUX NOMBRES ROTENBERG $\left(ROT1 \times \frac{A}{B}\right) / \left(ROT2 \times \frac{C}{D}\right)$

APPELLE LE SP : REDUC

ROT3 (I) = ROT1 (I) - ROT2 (I)
REDUC $\left(\frac{A}{C}\right)$; REDUC $\left(\frac{D}{B}\right)$
RESULTAT : ROT3 $\times \frac{AD}{BC}$

SP: REDUC (NA, NB) — SIMPLIFIE LA FRACTION NA/NB

APPELLE LE SP : PGCD

NA = NA / PGCD (NA, NB)
NB = NB / PGCD (NA, NB)

SP: PPCM (NA, NB) — CALCUL DU PLUS PETIT COMMUN MULTIPLE - PPCM - DES NBRES ENTIERS NA ET NB

APPELLE LE SP: PGCD

PPCM = NA × NB / PGCD (NA, NB)

SP: PGCD (NA, NB) — CALCUL DU PLUS GRAND COMMUN DIVISEUR - PGCD - DES NBRES ENTIERS NA ET NB

SP: DPGCD (DNA, DNB) — PGCD DES NBRES ENTIERS DOUBLE PRECISION DNA ET DNB

SP: ENTROT (IA, ROT) — TRANSFORMATION D'UN ENTIER IA EN ROTENBERG ROT

SP: ROTENT (ROT, NA) — TRANSFORMATION D'UN NOMBRE ROTENBERG EN NOMBRE ENTIER

- Si NA SUPERIEUR A 10^{17} IMPOSSIBLE
- Si NA SUPERIEUR A 10^{10} RESULTAT DOUBLE PRECISION DANS DNA
- Si NA INFERIEUR A 10^{10} RESULTAT ENTIER NORMAL DANS NA

- SP: IDBLROT (ROT) — TRANSFORMATION DE L'ENTIER DOUBLE PRECISION DANS EN ROTENBERG $ROT \times \frac{N}{1}$

APPELLE LE SP: INTER

SI PARTIE NON DECOMPOSEE-DN. DU NOMBRE ROTENBERG OBTENU EST :
- SUPERIEURE A 10^{10} IMPOSSIBLE
- INFERIEURE A 10^{8} N = IDINT (DN)
- ENTRE 10^{8} et 10^{10} APPEL DE INTER(NA)

- SP: INTER(NA) — TRANSFORMATION D'UN NOMBRE ENTIER DOUBLE PRECISION COMPRIS ENTRE 10^{8} et 10^{10} EN NOMBRE ENTIER

- SP: DUTER (DNX, NX) — TRANSFORMATION D'UN NOMBRE ENTIER COMPRIS ENTRE 10^{8} et 10^{10} EN NOMBRE ENTIER DOUBLE PRECISION

- SP: ROTPUI (ROT1, ROT2, PUI) — ELEVATION A LA PUISSANCE PUI/2 D'UN NOMBRE ROTENBERG DE LA FORME $ROT1 \times \frac{A}{B}$ - RESULTAT DANS ROT2

APPELLE LE SP: NSQRT

- Si PUI > 0 ET PAIR $A = A^{PUI/2}$ $B = B^{PUI/2}$
- Si PUI < 0 ET PAIR $A = B^{PUI/2}$ $B = A^{PUI/2}$
- Si PUI IMPAIR ET si A = B = 1 CONTINUE
- Si PUI IMPAIR ET Si A OU B PAS EGAL A 1 · TRAITEMENT SPECIAL -
  - APPEL DE NSQRT - A ET B DOIVENT ETRE DES CARRES PARFAITS

- SP: ROTRAC (ROT, LROT, N) — TRANSFORMATION D'UN NOMBRE ROTENBERG EN $A\sqrt{B}/C$

- SP: TABULE — TABULATION DES PUISSANCES DES NOMBRES PREMIERS
  - EN ENTIER : JUSQU'A $2^{35} \approx 10^{10}$
  - EN ENTIER DOUBLE PRECISION JUSQU'A 10^{17}

- BLOCK DATA

BLOC DE DONNEES PERMANENTES ACCESSIBLES PAR TOUS LES SP GRACE AUX BLOCS "COMM
- LES NOMBRES PREMIERS DE 1 A 67
- LES ADRESSES DES PUISSANCES TABULEES DES NOBES PREMIERS
  a) POUR LE CAS ENTIERS NORMAUX
  b) POUR LE CAS ENTIERS DOUBLE PRECISION

- SP · NSQRT (EN LANGAGE MACHINE)

EXTRACTION DES RACINES CARREES ENTIERES $\sqrt{A=N^2}$

(voir organigramme)

CONCLUSION GENERALE.

I) Résumé des travaux présentés.

L'ensemble du travail présenté est consacré à 3 points principaux:

- Le premier est la détermination explicite, dans le schéma SU_3 , d'un ensemble complet d'opérateurs effectifs à 3 particules, scalaires, hermitiques, symétriques et indépendants du spin, représentant, au second ordre de perturbation, les effets électrostatiques des interactions de configurations lointaines sur les configurations $(d+s)^n$. Ce travail a pour but de rendre possible l'étude complète, dans le schéma le mieux adapté, des configurations $(d+s)^n$ et $(d+s)^n p$ dans l'approximation du second ordre de la théorie du champ central.

- Le deuxième point est la mise en évidence, à propos de la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan (ou C.C.G.) $SU_3 \supset R_3$ nécessaires à la classification des opérateurs précédents, de la possibilité de réduire la dégénérescence interne grâce au choix d'opérateurs tensoriels couplés possédant des propriétés d'hermiticité déterminées. Ce choix définit une base d'états que nous comparons avec celles proposées par Judd, Miller, Patera et Winternitz (1974), bases qui correspondent à la caractérisation complète des états de $SU_3 \supset R_3$ à l'aide des valeurs propres d'un des deux invariants X^3 ou X^4 explicités dans l'article.

- Le troisième point est la réalisation d'un ensemble de deux programmes permettant le calcul automatique, sous forme exacte $N\sqrt{M}/P$ où N,M,P sont entiers, des C.C.G. des groupes de Lie semi-simples compacts, aux indéterminations dues aux dégénérescences près. Dans ce cas p solutions arbitraires orthonormées sont déterminées, dont la combinaison éventuelle dépend du problème traité.

- Cette réalisation, indispensable pour déterminer les C.C.G. $SU_3 \supset R_3$ nécessaires à notre étude, nous a permis en outre de participer à un travail parallèle faisant appel aux mêmes méthodes : la classification dans le schéma $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$ des opérateurs effectifs à 2 particules dépendant du spin et venant du terme de second ordre croisé de l'énergie coulombienne et de la structure hyperfine.

Chapitre I.

Le premier chapitre présente les méthodes générales utilisées. On rappelle notamment comment on peut tenir compte des effets du second ordre de perturbation sur les structures fines et les structures hyperfines par l'introduction d'opérateurs effectifs à plusieurs particules agissant entre les états de la configuration considérée. Puis, après un bref exposé sur l'utilisation en spectroscopie de la théorie des groupes de Lie, on traite plus particulièrement le principe de la classification dans le schéma $Sp_{10} \supset SU_2 \times (SO_5 \supset R_3)$ des opérateurs à 2 particules dépendant du spin agissant dans les configurations d^n et le principe de la classification dans le schéma $SU_{12} \supset SU_2 \times (SU_6 \supset SU_3 \supset R_3)$

des opérateurs scalaires à 3 particules indépendant du spin agissant dans les configurations $(d+s)^n$. On exprime ainsi la nécessité de classer états et opérateurs dans un même schéma de réductions pour pouvoir utiliser le théorène de Wigner-Eckart aux calculs d'éléments de matrice des opérateurs et la nécessité de déterminer les coefficients de Clebsch-Gordan (C.C.G.) des réductions considérées pour construire explicitement les opérateurs à plusieurs particules. Ceux-ci doivent être symétriques par rapport à tout échange des électrons et on décrit alors l'opération de pléthysme $\otimes$ qui permet d'extraire des produits de Kronecker les représentations qui correspondent à un type déterminé de symétrie de permutation. Le premier chapitre se termine sur l'exposé du principe général de la méthode, proche de celle de Nutter et Nielson, utilisée pour calculer les C.C.G. des groupes de Lie semi-simples compacts.

Chapitre II.

Le deuxième chapitre, consacré à la détermination des opérateurs effectifs électrostatiques de $(d+s)^n$ se divise en deux parties :

- La 1ère partie traite de la détermination des C.C.G. $SU_3 \supset R_3$ intervenant dans notre étude. Les opérateurs monoélectroniques se transforment comme les représentations $(11)+(22)$ de SU_3 en notation d'Elliott ; les C.C.G. calculés sont, d'une part, ceux qui permettent d'exprimer les opérateurs classés à 2 particules de rang quelconque, du type $\langle \lambda_1 \tau_1 k_1 + \lambda_2 \tau_2 k_2 | \alpha' \lambda' \tau' k' \rangle$ où λ_1 et λ_2 = (11) ou (22) et où les

λ' sont les représentations apparaissant dans les produits de Kronecker $\lambda_1 \times \lambda_2$ et, d'autre part, ceux qui interviennent dans l'expression des opérateurs scalaires classés à 3 particules, $\langle \alpha' \lambda' \tau' k' + \lambda_3 \tau_3 k_3 | \alpha \lambda \tau 0 \rangle$, où $\lambda_3 = (11)$ ou (22) et où les λ' sont les représentations précédentes. Ces calculs ont entraîné la détermination des éléments de matrice du générateur $(11)V^{+2}$ de $SU_3(d+s)$ entre les états $|\lambda' \tau' k'\rangle$ qui apparaissent.

On montre ensuite comment, à partir des solutions arbitraires fournies par le programme CLEGAC dans les cas dégénérés, on peut choisir les C.C.G. tels que les opérateurs classés à 2 particules

$$|\alpha' \lambda' \tau'] T^{k'} = \sum_{\tau_1 k_1 \tau_2 k_2} \langle \lambda_1 \tau_1 k_1 + \lambda_2 \tau_2 k_2 | \alpha' \lambda' \tau' k' \rangle \left\{ (\lambda_1 \tau_1) V^{k_1} (\lambda_2 \tau_2) V^{k_2} \right\}^{k'}$$

possèdent des propriétés d'hermiticité définies. On montre comment ce choix entraîne pour les états la levée des dégénérescences doubles internes du type $(\lambda\mu)k,k'$ et entraîne la levée partielle des dégénérescences supérieures. Après avoir explicité les relations entre les opérateurs infinitésimaux de SU_3 utilisés dans l'article cité plus haut et les nôtres, nous avons obtenu une forme tensorielle pour les invariants X^3 et X^4 qui nous a permis de montrer que la base correspondant à la diagonalisation de X^4 conduit aux mêmes états que les nôtres dans le cas d'une représentation autoconjuguée doublement dégénérée en k et que les liens sont plus complexes dans le cas des représentations non autoconjuguées.

- Dans la deuxième partie, nous montrons comment les opérateurs classés à 3 particules d'hermiticité définie permettent de construire plus

facilement un ensemble complet d'opérateurs effectifs à 3 particules scalaires, hermitiques et symétriques. Les représentations qui classent les opérateurs symétriques sont celles apparaissant dans le développement du pléthysme $[(11)+(22)]\otimes\{3\} = [(11)\otimes\{2\}]\times(22)+[(22)\otimes\{2\}]\times(11)+(11)\otimes\{3\}+(22)\otimes\{3\}$. Les résultats précédents permettent de construire facilement les 17 opérateurs venant des 2 premiers termes de l'expression ci-dessus. La construction des 2 opérateurs du type $(11)\otimes\{3\}$ permet de mettre en évidence le principe de la symétrisation complète des opérateurs, méthode que nous avons appliquée au cas plus difficile de la construction des 15 opérateurs symétriques appartenant au développement du terme $(22)\otimes\{3\}$. Cette deuxième partie s'achève sur le tableau récapitulatif de l'ensemble cherché des 34 opérateurs électrostatiques à 3 particules classés par rapport à $SU_3 \supset R_3$ et représentant la partie effective des interactions de configurations lointaines sur le groupe de configurations considérées $(d+s)^n$.

Chapitre III.

Le troisième chapitre traite de la classification des interactions de second ordre de structure hyperfine dans les configurations d^n . Après avoir situé le problème étudié et rappelé l'expression des opérateurs effectifs dans le cas du terme croisé énergie coulombienne-structure hyperfine, nous explicitons la classification formelle des interactions biélectroniques intervenant dans notre étude. Les opérateurs monoélectroniques $w^{\varkappa k}$ se transforment comme les représentations

$[\langle 0\rangle+\langle 1^2\rangle+\langle 2\rangle]$ de Sp_{10} ; les représentations classant les opérateurs biélectroniques symétriques sont celles apparaissant dans le pléthysme $[\langle 0\rangle+\langle 1^2\rangle+\langle 2\rangle]\otimes\{2\}$ dont les seuls termes du développement intéressants sont $\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle, \langle 1^2\rangle\otimes\{2\}, \langle 2\rangle\otimes\{2\}$. Les corrections $\Delta_\ell, \Delta_q, \Delta_{sc}$ à apporter aux 3 termes correspondants du 1er ordre de structure hyperfine, s'expriment en fonction d'opérateurs $(w_i^{\nu_1 k_1} w_j^{0 k_2})^{\nu k}$ avec respectivement $(\nu k) = (01),(02),(12)$ et les propriétés d'hermiticité permettent d'affirmer que seuls les opérateurs appartenant au produit $\langle 2\rangle\langle 1^2\rangle$ interviennent dans Δ_ℓ et Δ_{sc} et que ceux appartenant à $\langle 2\rangle\otimes\{2\}$ et $\langle 1^2\rangle\otimes\{2\}$ interviennent dans Δ_q . Après avoir calculé les C.C.G. utiles $SO_5 \supset R_3$, les tables des éléments de matrices du générateur U^3 de SO_5 , les C.C.G. $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ nécessaires, les éléments de matrice des générateurs w^{12} et w^{14} de Sp_{10} , nous déterminons explicitement les opérateurs biélectroniques symétriques cherchés permettant d'exprimer les 3 corrections Δ_ℓ , Δ_q , Δ_{sc} .

Chapitre IV.

Dans le quatrième chapitre nous décrivons les 2 programmes permettant de déterminer automatiquement les C.C.G. des groupes de Lie semi-simples compacts dans leurs réductions successives à R_3 .

La méthode décrite au chapitre I consiste à évaluer de 2 façons différentes les éléments de matrice de l'opérateur de Casimir du groupe considéré. On obtient alors k systèmes d'équations linéaires

$\sum_i a^k_{ij} x^k_i = 0$ dont les coefficients a^k_{ij} sont donnés, à l'aide de l'algèbre tensorielle de Racah, par des formules angulaires très générales et dont les inconnues sont les C.C.G. cherchés.

- Le premier programme CLEGA1 calcule les a^k_{ij} sous forme exacte $N\sqrt{M/P}$ en exécutant la formule littérale pour la liste de jeux de variables possibles et les range sous forme de matrices ou de systèmes à résoudre. La formule littérale peut prendre des formes très diverses suivant le problème traité et une caractéristique intéressante de CLEGA1 est de former un petit compileur qui construit à la lecture de la formule littérale la suite d'ordres à faire exécuter. Les procédés utilisés pour coder la suite d'opérations à effectuer sont imités des principes de la compilation Algol des ordres arithmétiques et fait appel aux techniques des piles de mémoires et de la notation polonaise ; l'exécution du programme ainsi construit a exigé l'écriture de 2 sous-programmes récurrents pouvant s'appeler l'un l'autre, écriture qui fait appel à une technique de "piles" d'états du système en cours de calcul. Les calculs angulaires se font à l'aide de l'algèbre Rotenberg.

- Les systèmes linéaires homogènes obtenus sont tels que tout intermédiaire de calcul s'exprime comme un nombre d'irrationnalité maximale en racine carrée ; il est donc possible de les résoudre exactement. La triangularisation des systèmes permet de mettre directement en évidence les équations proportionnelles correspondant aux racines multiples. La résolution est faite à l'aide d'une méthode d'élimination et on recherche dans les cas dégénérés k solutions orthonormales en annulant un certain nombre d'inconnues. Les calculs se font à l'aide

d'un ensemble de sous-programmes d'algèbre Rotenberg "double précision entière" où les opérations manipulent des nombres représentés par leur décomposition en puissance de nombres premiers.

Appendices.

Dans l'Appendice I nous reproduisons notamment le calcul détaillé du pléthysme $[(11)+(22)]\otimes\{3\}$ rencontré dans la classification des opérateurs de SU_3 . A ce propos nous donnons l'organigramme d'un petit programme qui nous a été nécessaire pour calculer et vérifier les très nombreux produits de Kronecker $(\lambda\mu)\times(\lambda'\mu')$ qui interviennent dans le développement du pléthysme étudié.

Enfin, d'Appendice II est consacré à l'étude théorique détaillée des configurations $(d+s)^n$ dans le schéma $SU_{12}\supset SU_2\times[SU_6\supset SU_3\supset R_3]$.

II) Commentaires et perspectives d'avenir.

Dans le courant de cet exposé nous avons signalé les prolongements possibles ou nécessaires des travaux présentés. Ainsi, la détermination des opérateurs à 3 particules permet d'envisager l'étude, dans le couplage SU_3 , des configurations $(d+s)^n$ de la série du fer, étape préalable nécessaire à l'étude complète des configurations $(d+s)^n p$ dans l'approximation du second ordre de perturbation.

- Le programme CLEGA1 qui construit les systèmes linéaires à résoudre pour obtenir les coefficients de Clebsch-Gordan des groupes de Lie est en réalité un programme très général capable, en principe, de calculer sous forme exacte n'importe quelle formule angulaire. Il représente une généralisation du programme AGENAC écrit au Laboratoire A. Cotton en collaboration avec Y. Bordarier et le Professeur Racah et son équipe de Jerusalem, programme déjà décrit ailleurs (Carlier (1967)).

- Le programme CLEGA2 résoud sous forme exacte les systèmes d'équations linéaires homogènes. Aucun problème n'est apparu dans le cas des systèmes pas ou peu dégénérés même d'ordre élevé et nous ne nous sommes pas heurtés aux limites du programme. Par contre le traitement de certains systèmes dégénérés entraîne assez rapidement, dès que l'ordre augmente, des impossibilités de calcul et une étude est nécessaire pour déterminer si l'extension du bloc calcul "Rotenberg" peut améliorer sensiblement le problème ou si la méthode de recherche des solutions arbitraires doit être modifiée. Néanmoins, tel qu'il est conçu, CLEGA2 a pu résoudre tous les cas nécessaires au travail présenté ici. Il a montré qu'il était capable de traiter des cas relativement complexes tel que le système 5 fois dégénéré d'ordre 11 rencontré dans la symétrisation des opérateurs à 3 particules.

L'ensemble de ces deux programmes a permis la détermination des C.C.G. nécessaires $SU_3 \supset R_3$, $SO_5 \supset R_3$, $Sp_{10} \supset SU_2 \times SO_5$ et le calcul des éléments de matrice des opérateurs monoélectroniques V^{+2} de SU_3 , U^3 de SO_5 , W^{12} et W^{14} de Sp_{10} . Il peut être utilisé dans de nombreuses autres études faisant intervenir les groupes de Lie semi-simples.

- On a vu que l'exploitation des propriétés d'hermiticité des opérateurs couplés, permet de diminuer l'arbitraire de détermination des C.C.G. et de résoudre complètement, sans mélange d'irrationnalité, les cas de dégénérescence interne double. Ceci est lié en partie au fait que chacune des représentations (11) et (22) classe des opérateurs monoélectroniques des 2 types -hermitique et antihermitique- et qu'on peut alors imposer aux opérateurs à 2 particules construits à partir d'eux d'être de l'un ou l'autre type d'hermiticité.
Des considérations approchées permettent de penser que toute représentation de SU_3 , autoconjuguée ou non, peut être regardée comme faisant partie du développement de produits de Kronecker du type (11)....(11) et que l'hermiticité doit toujours permettre de séparer les états en 2 catégories + et - sans mélange d'irrationnalité.
L'étude de cas plus complexes de dégénérescences permettrait de vérifier cette hypothèse et d'essayer de comprendre alors si c'est une propriété intrinsèque du groupe SU_3 . Une voie possible serait d'étudier par exemple comment s'exprime la séparation hermitique lorsqu'on utilise les états définis par la réduction canonique $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$ et d'étudier si les états $SU_3 \supset R_3$ "d'hermiticité donnée" sont développés sur des états $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$ possédant des propriétés particulières.

- En conclusion, nous espérons que le travail présenté ici forme un intermédiaire utile entre les théoriciens qui proposent de nouvelles méthodes théoriques et les classificateurs qui désirent pouvoir les éprouver rapidement dans leurs prochaines interprétations des spectres atomiques.

REFERENCES par ordre alphabétique

M. Aymar, Physica 48, 457 (1970)

H. Bacry, Leçons sur la théorie des groupes et les symétries des particules élémentaires (1967) - Ed. Gordon & Breach - Paris - Dist DONOD.

C. Bauche-Arnoult, Thèse de doctorat - Orsay (1972)

L. Bolliet, N. Gastinel, P.J. Laurent, Un nouveau langage scientifique - algol (1964)-Ed. Hermann - Paris

P.H. Butler & B.G. Wybourne - Atomic Data 3, 133 (1971)

P.H. Butler - J.Phys. Suppl au n° 11-12, 31 , C4-47 (1970)

P.H. Butler & King J. Math Phys. 14 , 741 (1973)

A. Carlier, Thèse de 3e cycle - Orsay (1967)

E.U. Condon & G.H. Shortley, The Theory of Atomic Spectra (1935)

A. Crubellier, voir S. Feneuille et A. Crubellier

J.P. Draayer & Yoshimi Akiyama J. Math Phys. 14 , 1904 (1973)

E. Durand, Solutions numériques des équations algébriques T.II (1961)
Ed. Masson & Cie - Paris

A.R. Edmonds, Angular Momentum in quantum Mechanics (1957)
Princeton University Press

J.P. Elliott, Proc.Roy. Soc 245 A, 128 (1958)
254 A, 562 (1958)

S. Feneuille, Thèse de doctorat Paris (1967)

S. Feneuille, J. Phys. 28 , 315, (1967)
28 , 701, (1967)
30 , 325, (1969)

S. Feneuille et A. Crubellier J.Phys. Suppl. au n° 11-12, 31 , C4-25 (1970)

E.M. Ibrahim, Proc Math.Phys.Soc Egypt 22 , 137 (1958)

B.R. Judd Operator Techniques in Atomic Spectroscopy (1963)
Mac Graw - Hill Book Co. Inc. New-York

B.R. Judd, Second Quantization & Atomic Spectroscopy (1967)
The Johns Hopkins Press, Baltimore

B.R. Judd & J.P. Elliott, Topics in Atomic & Nuclear Theory (1970)
Lectures at the University of Canterbury, New-Zealand
Ed. A.N. Brooks

B.R. Judd, W. Miller, J. Patera, P. Winternitz, J. Math.phys. 15, 1787 (1974)

B.R. Judd, La structure hyperfine des atomes et des molécules (1967)
Editions du C.N.R.S. Paris

P.C. King & S.P.O. Plunkett J.Phys. 33 , 145 (1972)

D.E. Littlewood, J. London Math. Soc. 11, 49 (1936)

C.W. Nielson & G.F. Koster, Spectroscopic coefficients for the p^N, d^N and f^N
Configurations (1963) the M.I.T. Press Cambridge Massachusetts

P. Nutter & C. Nielson, Raytheon Technical Memorandum T. 331 (1963)

S.P.O. Plunkett, on the plethysm of S. Functions Ref. inconnue (1972)

G. Racah Phys. Rev. 61, 186, (1942)
62, 438, (1942)
63, 362, (1943)
76, 1352, (1949)

G. Racah, Group Theory and Spectroscopy (1951)
Mineographed lecture notes - Princeton

K. Rajnak & B.G. Wybourne, Phys. Rev. 132, 280 (1963)
134, A 596 (1964)

J. Schrijver, Physica 45, 217 (1969)

J. Schrijver & P.E. Noorman, Physica 64, 269 (1973)

J.C. Slater, Phys. Rev. 34, 1293 (1929)

P.R. Smith & B.G. Wybourne J. Math. Phys. 9, 1040 (1968)

R.E. Trees, Phys. Rev. 83, 756 (1951)
84, 1089 (1951)

J.D. Vergados, Nucl. Phys. A 111 , 681 (1968)

B.G. Wybourne & P.H. Butler, Symmetry Principles and Atomic Spectroscopy (1970)
John Wiley & Sons, Inc - New-York.

Je remercie MM. les Professeurs JACQUINOT et CHABBAL qui m'ont permis de travailler au Laboratoire Aimé Cotton, et Serge FENEUILLE qui a accepté la direction de cette étude. Je remercie aussi M. le Professeur JUDD pour l'intérêt qu'il a pris à mon travail et M. le Professeur LEACH, mon parrain au C. N. R. S., pour ses conseils et ses encouragements.

Pour bien des calculs sur ordinateur j'ai bénéficié de l'assistance efficace de Jocelyne SINZELLE. Je la remercie sincèrement, ainsi que Claire BAUCHE, pour toute l'aide qu'elles m'ont apportée. J'aurais voulu pouvoir citer tous ceux qui, avec Michèle CRANCE et Eliane LUC, ont participé à la préparation matérielle de ce mémoire dont la frappe difficile a été assurée en grande partie par G. FONTAINE.

C'est avec une très amicale reconnaissance que je remercie Anne CRUBELLIER qui a bien voulu m'initier à l'utilisation de la théorie des groupes et m'a sans réserve fait profiter de son expérience en ce domaine, aide précieuse qui m'a permis d'éclaircir certains problèmes.

Je suis heureuse d'avoir l'occasion de rappeler aussi combien fut amicale et fructueuse l'étroite collaboration qui a régné entre les anciens membres de l'équipe théorique, et tout ce que j'ai acquis auprès de Jacques BAUCHE et d'Yves BORDARIER pendant les nombreuses années durant lesquelles nous avons travaillé ensemble.

Enfin je voudrais tout particulièrement remercier ici les camarades du laboratoire qui, dans les heures difficiles, m'ont amicalement apporté leur aide et leur réconfort et témoigné leur confiance.

APPENDICE I

PLETHYSMES

Dans cet appendice sont définies d'abord quelques notions utilisées dans le courant de cet exposé et notamment au chapitre I.

Ainsi, la première partie est consacrée à des rappels sur le groupe des permutations et les fonctions symétriques et la deuxième partie à des rappels sur les liens entre le groupe linéaire complet ou le groupe unitaire et les fonctions de Schur. Ces 2 parties sont largement inspirées de l'exposé de B. G. Wybourne dans son livre "Symmetry principles and atomic spectroscopy" (1970).

Nous avons décrit brièvement dans la 3ème partie un programme de calcul et de rangement de fonctions de produits de Kronecker qui nous a été nécessaire pour l'évaluation de certains pléthysmes.

Les règles de calcul des pléthysmes sont rappelées dans la quatrième partie et dans la dernière partie nous avons explicité en détail le calcul du pléthysme $[\{42\}+\{21\}] \otimes \{3\}$ nécessaire à la classification des opérateurs à 3 particules dans $(d+s)^N$ étudiés au chapitre II, pléthysme qui ne figure pas dans les tables publiées par les différents auteurs.

Le plan est donc le suivant :

I) Rappels sur le groupe symétrique et les fonctions symétriques.

1°) Le groupe S_n .

2°) Graphe de Hook des diagrammes d'Young.

3°) Immanent - Déterminant - Permanent d'une matrice.

4°) Fonctions symétriques.

5°) Les fonctions de Schur ou fonctions "S" .

6°) Produits extérieurs des représentations de S_n et produit extérieur de fonctions S .

7°) Produits intérieurs des représentations de S_n et produit intérieur de fonctions S .

II) Le groupe linéaire complet GL(n) , le groupe unitaire et les fonctions de Schur.

1°) Matrices composées d'ordre r d'une matrice A .

2°) Matrices induites d'ordre r d'une matrice A .

3°) Invariants matriciels - Produit de Kronecker de 2 R.I. de GL(n) ou U(n) .

III) Programme de calcul de fonctions de produits extérieurs de fonctions S .

IV) Règles de calcul des pléthysmes.

V) Evaluation du pléthysme $[\{42\}+\{21\}] \otimes \{3\}$.

1°) Calcul de $\{21\} \otimes \{2\}$ dans S_n et réduction à SU_3 .

2°) Calcul de $\{42\} \otimes \{2\}$ dans S_n et réduction à SU_3 .

3°) Calcul de $\{21\} \otimes \{3\}$ dans S_n et réduction à SU_3 .

4°) Calcul de $\{42\} \otimes \{3\}$ dans S_n et réduction à SU_3 .

5°) $[\{42\}+\{21\}] \otimes \{3\}$

- Dimension des représentations de S_{12} et tables des pléthysmes $\{4\} \otimes \{3\}$, $\{4\} \otimes \{21\}$, $\{4\} \otimes \{1^3\}$.
- Dimension des représentations de S_{15} et table des pléthysmes $\{5\} \otimes \{3\}$, $\{5\} \otimes \{21\}$, $\{5\} \otimes \{1^3\}$.
- Dimension des représentations de S_{18} et table du pléthysme $\{42\} \otimes \{3\}$.
- Pléthysme $[\{42\}+\{21\}] \otimes \{3\} - \{42\} \otimes \{3\}$.

I) Rappels sur le groupe symétrique et les fonctions symétriques.

1°) Le groupe S_n .

Les n! permutations de n quantités $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & & \dots & p_n \end{pmatrix}$ forment un groupe appelé le groupe symétrique. Toute permutation peut s'écrire sous forme d'un produit de k cycles n'ayant pas d'éléments en commun. Par exemple $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (134)(25)$. L'ensemble des permutations conjuguées d'une permutation α , soit $\gamma\alpha\gamma^{-1} = \beta$, forment une classe et ont même structure de cycles. Une structure de cycles caractérise donc une classe.

Si ν_1 est le nombre de cycles d'un élément,

$\vdots$

ν_k est le nombre de cycles de k éléments,

on a $1\times\nu_1+2\times\nu_2+..+n\nu_n = n$.

Ainsi chaque solution d'entiers positifs $\nu_1 \dots \nu_n$ donne une classe de S_n et le nombre de classes est le nombre de solutions. En posant

$$\begin{aligned} \nu_1+\nu_2+..+\nu_n &= \lambda_1 \\ \nu_2+..+\nu_n &= \lambda_2 \\ &\vdots \\ \nu_n &= \lambda_n \end{aligned}$$

on a :

$$\lambda_1+\lambda_2+..+\lambda_n = n \qquad \text{avec} \qquad \lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant .. \geqslant \lambda_n \geqslant 0 \ .$$

Chaque solution correspond à une partition de n . On peut représenter la partition $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = n$ correspondant à une classe de S_n par un diagramme d'Young avec $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \dots \geqslant \lambda_n$. Il lui correspond une représentation irréductible (R.I.) complètement déterminée par le

diagramme . Le diagramme obtenu en changeant les lignes et les colonnes est appelé diagramme associé. On appelle tableaux standards ceux qui correspondent à une répartition des chiffres 1...n en ordre lexicologique dans chaque ligne et chaque colonne. Alors la dimension f^{λ} de la R.I. caractérisée par la partition λ de n est égale au nombre de tableaux standards associés au diagramme λ et on a $f^{\lambda} = n! \dfrac{\Pi_{(i<k)} (\ell_i - \ell_k)}{\ell_1! \, \ell_2! \, .. \, \ell_r!}$ $\quad \ell_1 = \lambda_1 + r - 1$ $\quad \ell_r = \lambda_r$.

2°) Graphe de Hook des diagrammes d'Young.

La longueur "hook" d'une case d'un diagramme d'Young est égale à $\alpha+\beta+1$ où β est le nombre de cases situées sous la case considérée (même colonne) et α le nombre de cases à droite de la case considérée (même ligne).

Si $\ell_0 \ell_1 .. \ell_p$ sont les longueurs des cases de la 1ère colonne, alors le produit $H_{[\lambda]}$ est défini comme $H_{[\lambda]} = \dfrac{\ell_0! \, \ldots \, \ell_p!}{\Pi_{(i<j)} (\ell_i - \ell_j)}$ et on peut écrire $f^{\lambda} = \dfrac{h!}{H_{[\lambda]}}$ avec $\sum_{[\lambda]} (f^{\lambda})^2 = n!$.

3°) Immanent - Déterminant - Permanent d'une matrice d'ordre n^2 $[a_{st}]$.

Soit S une permutation $e_1 \ldots e_n$ des nombres $1...n$ et $\chi^{(\lambda)}(S)$ le caractère du groupe S_n correspondant à la partition (λ) .

L'immanent est défini pat $|a_{st}|^{(\lambda)} = \Sigma\, \chi^{(\lambda)}(S) P_S$ où la somme est faite sur les n! permutations et où $P_S = a_{1,e_1} \ldots a_{n,e_n}$.

2 cas particuliers $|a_{st}|^{(n)}$ est le permanent de $[a_{st}]$ noté $^{+}|a_{st}|^{+}$

$|a_{st}|^{(1^n)}$ est le déterminant de $[a_{st}]$ noté $|a_{st}|$

4°) Fonctions symétriques.

On définit 4 sortes de fonctions symétriques de k arguments $\alpha_1 .. \alpha_k$:

- a) Monôme symétrique : $M_\rho = \Sigma\, \alpha_1^{\rho_1} \ldots \alpha_r^{\rho_r}$ où $\rho = \rho_1 .. \rho_r$ est une partition et où la somme se fait sur toutes les permutations des α (1)

- b) Sommes de produits homogènes : $h_r = \Sigma_\rho\, M_\rho$ (2)

- c) Fonctions symétriques élémentaires : $a_r = \Sigma\, \alpha_1 \ldots \alpha_r$. C'est le monôme correspondant à la partition (1^r) (3)

- d) Somme de puissances : $S_r = \Sigma\, \alpha_1^r$ (4) .

5°) Les fonctions de Schur ou fonctions "S" .

Si (λ) est une partition de r la fonction S notée $\{\lambda\}$ est le déterminant défini par $\{\lambda\} = |h_{\lambda_s - s+t}|$ avec $\begin{vmatrix} h_0 = 1 \\ h_r = 0 \quad \text{si} \quad r<0 \end{vmatrix}$ (5)

Ainsi $\{r\} = h_r$ (6)

On a aussi $\{\lambda\} = |a_{\mu_s - s+t}|$ où μ est la partition conjuguée de (λ) avec $\begin{vmatrix} a_0 = 1 \\ a_r = 0 \quad \text{si} \quad r<0 \end{vmatrix}$.

Alors $\{1^r\} = a_r = h_1^r$ (7)

Enfin si on représente par $[Z_r]$ la matrice $[Z_r] = \begin{vmatrix} S_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ S_2 & S_1 & 2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ S_r & \dots & \dots & \dots & S_1 \end{vmatrix}$

on a les relations $r!\, a_r = |Z_r|$ $\quad r!\, h_r = {}^+|Z_r|^+$ et la fonction de Schur $\{\lambda\}$ correspondant à la partition (λ) est définie par l'immanent :

$$\boxed{r!\, \{\lambda\} = |Z_r|^{(\lambda)}} \qquad (8) \quad .$$

Soit ρ la classe $(1^\alpha 2^\beta ..)$ d'ordre h_ρ de S_n et soit $K_\rho = S_1^\alpha S_2^\beta \dots$ où les S_i sont les sommes de puissances définies ci-dessus ; alors on peut exprimer la fonction de Schur $\{\lambda\}$ comme une combinaison linéaire des caractères $\chi_\rho^{(\lambda)}$ de S_n associés avec les représentations caractérisées par les partitions (λ) :

$$\boxed{n!\, \{\lambda\} = \sum_\rho \chi_\rho^{(\lambda)} h_\rho K_\rho}$$

6°) Produits extérieurs pour S_n et produits extérieurs de fonctions S .

Le produit de Kronecker de 2 représentations ρ et σ de 2 groupes différents S_m et S_n forme une représentation $\rho\times\sigma$ du produit direct $S_m \times S_n$ sous-groupe de S_{m+n} . La décomposition de ce produit en fonction des représentations de S_{m+n} définit le produit extérieur des 2 représentations.

Le produit extérieur de 2 fonctions S $\{\rho\}$ et $\{\sigma\}$ de degré m et n s'exprime comme une somme de fonctions S $\{\nu\}$ de degré m+n soit $\{\rho\}\{\sigma\} = \sum_{\nu} \Gamma_{\rho\sigma\nu}\{\nu\}$ et on montre qu'il existe une correspondance biunivoque entre les partitions (ρ) (σ) (ν) du produit extérieur de 2 fonctions S $\{\rho\}\{\sigma\}$ et celles caractérisant les représentations irréductibles du groupe S_{m+n} apparaissant dans la décomposition du produit extérieur des 2 représentations ρ et σ .

On peut calculer le produit extérieur de 2 fonctions S en les explicitant sous forme de fonctions symétriques définies plus haut. Ainsi les équations (2), (3), (6), (7) permettent d'écrire $\{1\}\{1\} = (\Sigma\alpha_1)(\Sigma\alpha_1) = \Sigma\alpha_1^2 + 2\Sigma\alpha_1\alpha_2$, $\{2\} = \Sigma\alpha_1^2 + \Sigma\alpha_1\alpha_2$ et $\{1^2\} = \Sigma\alpha_1\alpha_2$ donc $\{1\}\{1\} = \{2\}+\{1^2\}$ ou encore .

Les règles de multiplication des diagrammes se généralisent ainsi: les fonctions S qui apparaissent dans le produit $\{\rho\}\{\sigma\} = \{\rho_1..\rho_m\}\{\sigma_1..\sigma_n\}$ sont celles correspondant aux graphes qu'on peut construire en ajoutant au graphe (ρ) σ_1 symboles α , σ_2 symboles β , ...etc... avec les restrictions suivantes :

1) Après l'addition de chaque symbole il n'y a pas 2 symboles identiques dans la même colonne,

2) Si après l'addition de chaque symbole on compte les α , β , γ ... de droite à gauche, ligne après ligne, alors à chaque instant le nombre des α doit être $\geqslant$ au nombre des β , $\geqslant$ au nombre des γ $\geqslant$ ... etc.

Les dimensions vérifient $\boxed{f^{\{\rho\}\{\sigma\}} = \frac{(m+n)!}{m!\ n!}\, f^{(\rho)} f^{(\sigma)} = \Sigma\, \Gamma_{\rho\sigma\nu}\, f^{\nu}}$

les mêmes règles donnent donc la décomposition du produit extérieur de 2 représentations ρ et σ des groupes S_m et S_n .

7°) Produit intérieur de 2 fonctions S et produit intérieur de 2 représentations de S_n .

L'analyse du produit de Kronecker de 2 représentations ρ et σ d'un même groupe S_n , appelé produit intérieur et noté $\rho \circ \sigma$ revient à considérer la décomposition des caractères $\chi^{\rho}\chi^{\sigma} = \sum_{\nu} g_{\rho\sigma\nu}\, \chi^{\nu}$ (9) .

Si ρ et σ sont des partitions d'un même entier n et si $\chi^{\rho}\chi^{\sigma} = \sum_{\nu} g_{\rho\sigma\nu}\, \chi^{\nu}$ alors le produit $\{\rho\}\circ\{\sigma\} = \sum_{\nu} g_{\rho\sigma\nu}\, \{\nu\}$ définit le produit intérieur des fonctions S $\{\rho\}$ et $\{\sigma\}$ et les dimensions vérifient $\boxed{f^{\rho\circ\sigma} = f^{\rho} \times f^{\sigma} = \Sigma\, g_{\rho\sigma\nu}\, f^{\nu}}$.

Un théorème de Littlewood permet de calculer $\{\rho\}\circ\{\sigma\}$ sans connaître les tables de caractères des groupes symétriques

$(\{\lambda\}\{\mu\})\circ\{\nu\} = \Sigma\, \Gamma_{\rho\sigma\nu}\, (\{\lambda\}\circ\{\rho\})(\{\mu\}\circ\{\sigma\})$ ou $\{\rho\}\{\sigma\} = \Sigma\, \Gamma_{\rho\sigma\nu}\, \{\nu\}$.

En fait nous verrons un peu plus loin dans l'évaluation du pléthysme $[\{42\}+\{21\}] \otimes \{3\}$ que les calculs n'ont introduit que des produits intérieurs simples et nous avons utilisé directement la décomposition des caractères des groupes symétriques correspondants (9) .

II) Le groupe linéaire complet, le groupe unitaire et les fonctions de Schur.

Les matrices A non singulières d'ordre n^2 forment le groupe linéaire complet GL(n) et forment elles-mêmes une représentation matricielle de GL(n) dont le caractère est donné par les traces des matrices A et est équivalent à la fonction élémentaire symétrique a_1 des racines caractéristiques de A . D'après la relation (7) le caractère est simplement la fonction $S\{1\}$. De même, le caractère de la représentation identité est la fonction $S\{0\}$.

On montre que tous les caractères de GL(n) peuvent s'exprimer en terme de fonctions S des racines des matrices A . Pour cela on définit 3 notions, les matrices composées d'ordre r , les matrices induites d'ordre r d'une matrice A et les invariants matriciels de A .

1°) Matrice composée d'ordre r d'une matrice A .

a) Matrice composée d'ordre 2. Soit X $(x_1 \ldots x_n)$ et Y $(y_1 \ldots y_n)$ deux vecteurs colonnes, A une matrice $[a_{st}]$ non singulière d'ordre n^2 et X' et Y' les transformés de X , Y par A : X' = AX , Y' = AY . On peut formet les $\frac{n(n-1)}{2}$ fonctions linéaires alternées de X et Y et chercher les fonctions correspondantes de X' et Y' .

Si $x^{ij} = x_i y_j - x_j y_i$ alors $x'^{ij} = \Sigma a_{ip} x_p \; \Sigma a_{jq} y_q - \Sigma a_{iq} x_q \; \Sigma a_{jp} y_p$ et le coefficient de $x^{pq} = x_p y_q - x_q y_p$ est $\begin{vmatrix} a_{ip} & a_{iq} \\ a_{jp} & a_{jq} \end{vmatrix}$. Donc la

matrice de transformation des x^{ij} est une matrice dont les éléments sont des mineurs d'ordre 2 de A, appelée matrice composée d'ordre 2 de A et notée $A^{\{1^2\}}$.

b) Matrice composée d'ordre r. De la même façon les fonctions alternées de r vecteurs $X_1 \ldots X_r$ transformés par une même matrice A seront transformées par une matrice à C_r^n lignes et colonnes dont les éléments sont des mineurs d'ordre r de A, appelée matrice composée d'ordre r de A et notée $A^{\{1^r\}}$.

Les matrices composées $A^{\{1^r\}}$ forment une représentation de $GL(n)$: $[AB]^{\{1^r\}} = A^{\{1^r\}} B^{\{1^r\}}$ et les traces des $A^{\{1^r\}}$ sont des caractères du groupe.

Or les fonctions symétriques élémentaires $a_k = \Sigma\, \alpha_1 \ldots \alpha_k$ sont directement connectées avec l'équation dont les racines sont les $\alpha_1 \ldots \alpha_n$: $g(x) = (x-\alpha_1)(x-\alpha_2)\ldots(x-\alpha_n) = x^n - a_1 x^{n-1} \ldots + (-1)^n a_n$. Ici, si on appelle λ les racines de A on a $g(\lambda) = |A-\lambda I| = \lambda^n - a_1\lambda^{n-1} \ldots + (-1)^n a_n = 0$ et on a le résultat général suivant : les fonctions $S\ \{1^r\}$ des racines des matrices A de $GL(n)$ sont des caractères simples du groupe.

2°) Matrices induites d'une matrice A.

On considère n variables $x_1 \ldots x_n$ transformées par une matrice $A \equiv [a_{st}]$ soit $X' = AX$ et on forme cette fois les $n(n+1)/2$ produits ou puissances de degré deux, soit x_1^2, $x_2^2 \ldots$, $x_1 x_2$, $x_{n-1} x_n$.

Les éléments de la matrice de transformation de ces produits sont les polynômes de degré 2 des éléments de A . Cette matrice est appelée matrice induite d'ordre 2 de A et notée $A^{\{2\}}$. De même, les produits de degré r sont transformés par une matrice à C_r^{n+r-1} lignes et colonnes dont les éléments sont des polynômes de degré r des éléments de A . Cette matrice est appelée induite d'ordre r de A et on a le résultat suivant : les fonctions $S\{r\}$ des racines des matrices A de $GL(n)$ sont des caractères simples du groupe.

3°) Invariants matriciels - Produit de Kronecker de 2 représentations de $GL(n)$ ou $U(n)$.

Le concept d'invariant matriciel est nécessaire pour obtenir l'ensemble des caractères de $GL(n)$, comme l'immanent était nécessaire pour obtenir l'ensemble des caractères de S_n et on a utilisé la notion d'invariant au chapitre I pour expliciter l'opération de plethysme. Soit A une matrice d'ordre n^2 et $T(A)$ une matrice dont les éléments sont des polynômes des éléments de A . Si on a $T(A)T(B) = T(AB)$ alors $T(A)$ est dit un invariant matriciel de A et donne une représentation matricielle de $GL(n)$. $A^{\{1^r\}}$ et $A^{\{r\}}$ sont des cas particuliers d'invariants matriciels $A^{\{\mu\}}$ comme de déterminant $[a_{st}]^{\{1^n\}}$ et le permanent $[a_{st}]^{\{n\}}$ étaient des cas particuliers de l'immanent $[a_{st}]^{\{\lambda\}}$. Le produit direct de 2 invariants est un invariant et tout invariant de degré r des éléments de A peut être obtenu par réduction du produit direct de r matrices identiques A . Enfin Schur a démontré qu'il existe autant d'invariants matriciels de $A(n,n)$ de

degré r , qu'il existe de partitions de r en pas plus de n parties et leurs traces sont les fonctions S de poids r des racines de A .

Le produit direct $A^{\{\mu\}}{}_A{}^{\{\lambda\}}$ de 2 invariants de degré m et n peut être résolu en une somme d'invariants $A^{\{\nu\}}$ de degré mn soit $A^{\{\mu\}}{}_A{}^{\{\lambda\}} = \sum_\nu \Gamma_{\mu\lambda\nu}\ A^{\{\nu\}}$ et comme les traces sont des fonctions S des racines de A c'est équivalent au produit extérieur des fonctions S $\{\mu\}.\{\lambda\} = \sum_\nu \Gamma_{\mu\lambda\nu}\ \{\nu\}$. Donc le produit de Kronecker de 2 représentations irréductibles de $GL(n)$ est donné par les mêmes règles que le produit extérieur des 2 fonctions S associées.

Les mêmes résultats sont valables pour le groupe unitaire $U(n)$ c'est-à-dire que les représentations irréductibles de $U(n)$ sont les invariants matriciels des matrices A , les caractères simples de $U(n)$ sont les fonctions S des racines des A et le produit de Kronecker de 2 représentations irréductibles de $U(n)$ peut être évalué à l'aide du produit extérieur des fonctions S associées.

Enfin, les dimensions des représentations irréductibles de $GL(n)$ ou de $U(n)$ sont données par $\boxed{D_{\{\lambda\}} = G_{(n)}^{\{\lambda\}} \,/\, H_{[\lambda]}}$ où $H_{[\lambda]}$ est le "hook" du diagramme d'Young (λ) et où $G_{(n)}^{\{\lambda\}} = \prod_{i,j} (n+i-j)$.

III) Programme FNKRON de calcul et de rangement de fonctions de produits extérieurs de fonctions de Schur (produits de Kronecker).

Les pléthysmes s'expriment comme de très longs développements de produits de Kronecker des représentations des groupes considérés et on sait que les produits de Kronecker de 2 représentations $\{\lambda\}$ et $\{\mu\}$ pour $GL(n)$, $U(n)$ ou $SU(n)$ sont donnés par les mêmes règles que la multiplication extérieure $\{\lambda\}_{\circ}\{\mu\}$ des fonctions de Schur associées ou encore que le produit extérieur $\{\lambda\}_{\circ}\{\mu\}$ des 2 représentations des groupes S_p et S_q si (λ) et (μ) sont respectivement des partitions de p et de q .

Nous avons écrit, pour nous aider dans l'évaluation du pléthysme $(\{42\}+\{21\}) \otimes \{3\}$ qui nous était nécessaire, un programme qui calcule des séries d'expressions du type

$$E_{\pm} = \pm [\{\lambda_1\}+\ldots+\{\lambda_i\}+\ldots+\{\lambda_m\}] \times [\{\mu_1\}+\ldots+\{\mu_j\}+\ldots+\{\mu_n\}] = \pm \sum_{i=1} \sum_{j=1} \{\lambda_i\}\{\mu_j\}$$

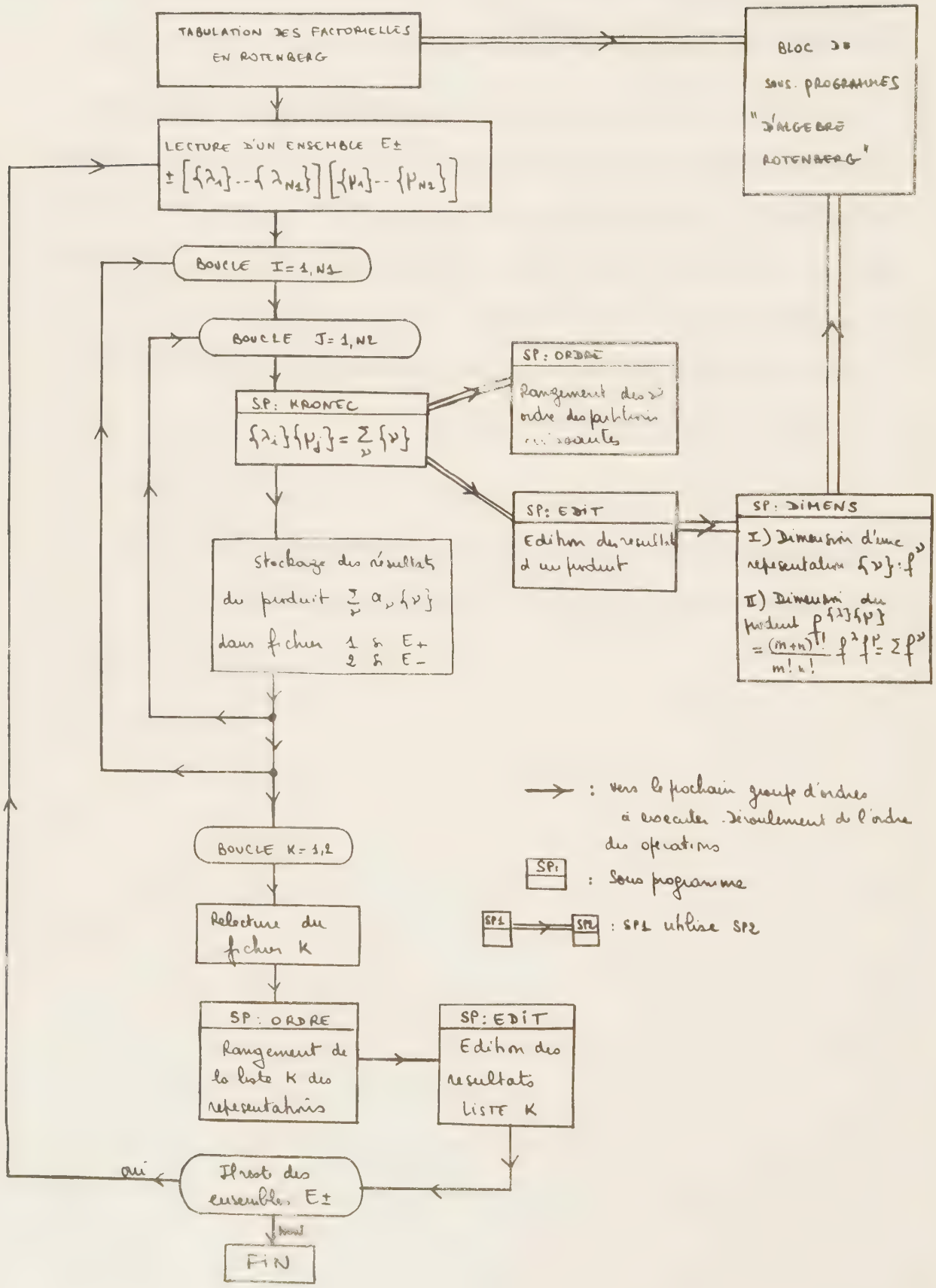
Le développement de chaque produit $\{\lambda_i\}\{\mu_j\} = \sum_{\nu} a_{\lambda\mu\nu} \{\nu\}$ est déterminé, ordonné, édité et stocké provisoirement dans une des deux listes d'attente suivant que le produit fait partie d'une expression précédée d'un signe + ou d'un signe - et une vérification est faite à l'aide des formules donnant les dimensions des représentations de S_n et la dimension du produit extérieur des fonctions S . Il a été nécessaire pour le calcul des dimensions d'utiliser un ensemble de

programmes d'"algèbre Rotenberg" [cf. chapitre IV] et de tabuler les factorielles sous forme Rotenberg.

Lorsque toutes les expressions $E_{\pm}$ données ont été déterminées, chacune des deux listes résultantes est ordonnée et éditée. L'édition des produits et des listes se fait dans l'ordre des partitions croissantes $[\{41^2\},\{42\},\{53\}....]$, $\nu_1 \leqslant \nu'_1 \ldots \nu_k \leqslant \nu'_k \ldots$ et les partitions identiques sont regroupées à l'aide d'un facteur numérique. L'extrait de listing donné à la fin du calcul du pléthysme § V donne un aperçu sur l'édition d'une liste finale.

Nous donnons dans ce qui suit une description succincte de l'organisation générale du programme et un organigramme détaillé du sous-programme de calcul d'un produit de Kronecker $\{\lambda\}\{\mu\}$.

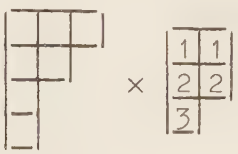
1°) Organisation générale → Programme principal FNKRON .



2°) Sous-programme KRONEC de détermination du produit

$$\{\lambda\}\{\mu\} = \sum_{\nu} a_{\nu} \{\nu\} \quad .$$

Nous avons programmé les règles de multiplication des tableaux d'Young données en (I 6°) de cet appendice



= graphe 1 × graphe 2 .

. Pour des raisons de facilité de recherche systématique des diagrammes $\{\nu\}$ répondant au problème, le principe général de placement des symboles K est le suivant :

- On part du graphe 1 et on traite le premier groupe de symboles, soit K=1 . On place les symboles (1) en commençant non pas par la première ligne mais par la dernière possible, c'est-à-dire, ici, NL1+1 , si NL1 est le nombre de lignes du graphe 1. On place le maximum permis de symboles 1 et on continue ainsi, en remontant, jusqu'à épuisement des symboles 1, le dernier 1 placé se trouvant par exemple sur ligne I . On obtient un graphe provisoire R1(K,1) . Pour le 1er groupe (K=1) de symboles, les cases permises sont celles conservant le diagramme régulier (Nombre de cases ligne I $\geqslant$ Nombre de cases ligne I+1) .

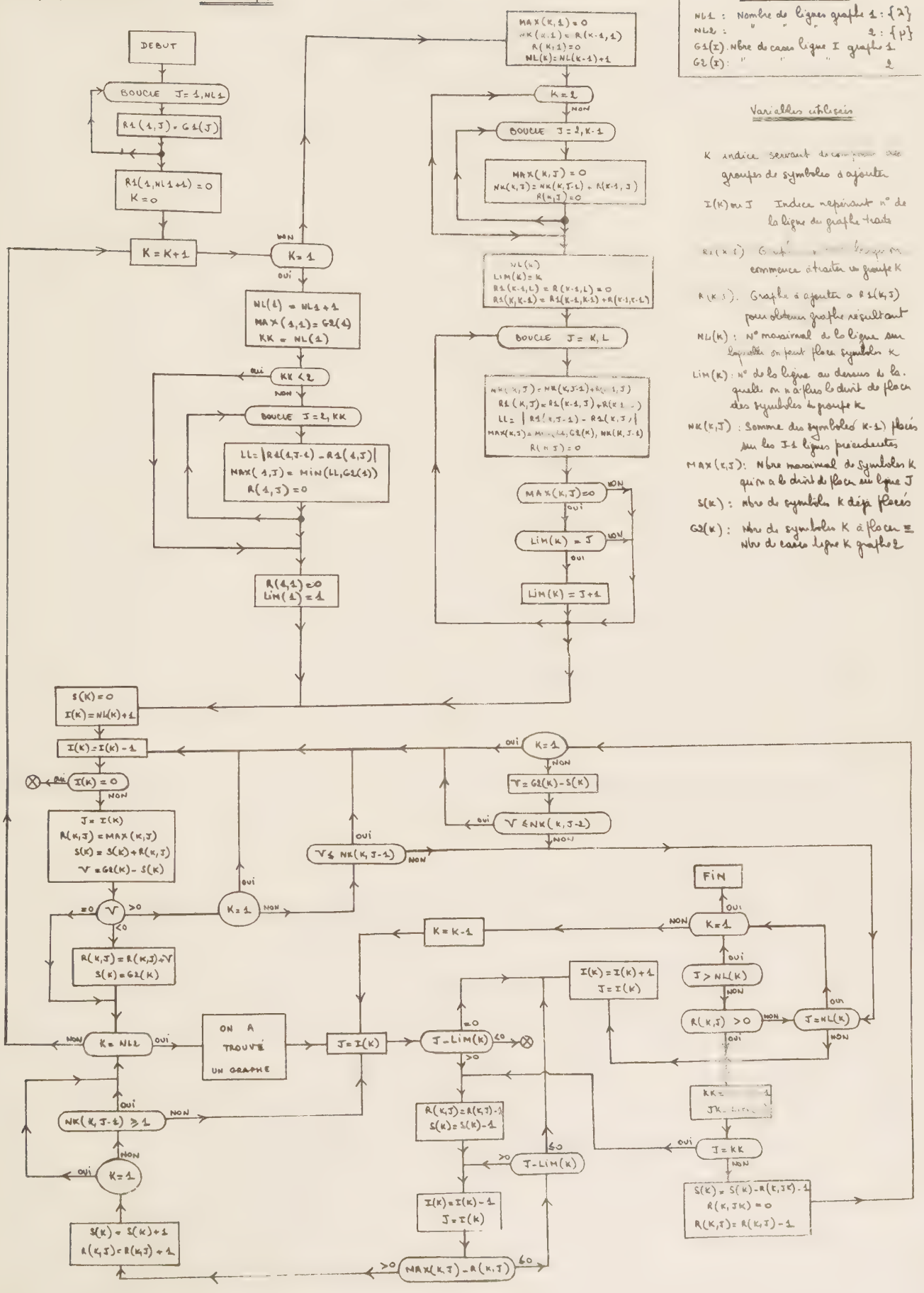
- On part ensuite du graphe R1(1,I) et on place le 2ème groupe de symboles (K=2) en partant encore de la dernière ligne permise d'après les règles du produit. Les cases permises cette fois doivent, d'une part, conserver le diagramme régulier, mais aussi vérifier ΣNbre 1 $\geqslant$ ΣNbre 2 à chaque ligne.

- On continue jusqu'à épuisement des groupes de variables du graphe 2. On a alors trouvé un graphe répondant au problème.

. On reprend ensuite le dernier groupe K de variables et on regarde pour le dernier symbole K placé sur la ligne I(K) si on a le droit de le faire remonter sur une ligne supérieure.
Si oui, on a trouvé un graphe et on essaie à nouveau de faire remonter un symbole K .
Si non, on repart du groupe de symboles (K-1) et on cherche à faire remonter un symbole K-1 .
Supposons que le premier symbole qu'on puisse faire remonter soit un symbole $K-\alpha$, on reprend alors le remplissage des cases des groupes $(K-\alpha+1)$ jusqu'à (K) suivant le même principe que précédemment.

La recherche s'arrête si on ne peut plus faire remonter de symboles K=1 : tous les graphes $\{\nu\}$ sont trouvés et stockés. Ils sont alors ordonnés, édités et stockés dans une des 2 listes provisoires.

Sous programme KRONEC $\{1\} \times \{p\}$



Données de KRONEC

NL1 : Nombre de lignes graphe 1 : {1}
NL2 : " " " 2 : {p}
G1(I) : Nbre de cases ligne I graphe 1
G2(I) : " " " " 2

Variables utilisées

K : indice servant de compteur des groupes de symboles à ajouter

I(K) ou J : Indice repérant n° de la ligne du graphe traité

R1(K,I) : Graphe à ajouter à R1(K,J) pour obtenir graphe résultant

NL(K) : N° maximal de la ligne sur laquelle on peut placer symbole K

LIM(K) : N° de la ligne au dessus de la quelle on n'a plus le droit de placer des symboles du groupe K

NK(K,J) : Somme des symboles (K-1) placés sur les J-1 lignes précédentes

MAX(K,J) : Nbre maximal de symboles K qu'on a le droit de placer sur ligne J

S(K) : Nbre de symboles K déjà placés

G2(K) : Nbre de symboles K à placer = Nbre de cases ligne K graphe 2

IV) Règles de calcul des pléthysmes.

L'opération de pléthysme est distributive à droite pour l'addition, la soustraction, la multiplication

1 $A \otimes (BC) = (A \otimes B)(A \otimes C) = A \otimes BA \otimes C$

2 $A \otimes (B \pm C) = A \otimes B \pm A \otimes C$

3 $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$

4 $(A+B) \otimes \{\lambda\} = \Sigma\, \Gamma_{\mu\nu\lambda}\, (A \otimes \{\mu\})(B \otimes \{\nu\})$

où $\Gamma_{\mu\nu\lambda}$ est le coefficient de $\{\lambda\}$ dans le produit extérieur $\{\mu\}\{\nu\}$

5 $(A-B) \otimes \{\lambda\} = \Sigma\, (-1)^r\, \Gamma_{\mu\nu\lambda}\, (A \otimes \{\mu\})(B \otimes \{\bar{\nu}\})$

où $\{\bar{\nu}\}$ est la partition de r conjuguée de $\{\nu\}$

6 $(AB) \otimes \{\lambda\} = \Sigma\, g_{\mu\nu\lambda}\, (A \otimes \{\mu\})(B \otimes \{\nu\})$

où $g_{\mu\nu\lambda}$ est le coefficient de $\{\lambda\}$ dans le produit intérieur $\{\mu\} \circ \{\nu\}$.

Les symboles apparaissant à gauche du signe $\otimes$ ne sont pas nécessairement des fonctions S .

Pléthysme des fonctions S .

Plusieurs théorèmes simplifient l'évaluation des pléthysmes et nous ne donnons ici que ceux qui nous ont été necessaires :

si $\{\lambda\} \otimes \{\pi\} = \sum_{\nu} \{\nu\}$ alors

7 $$\sum_{\zeta,\nu} \Gamma_{1\zeta\nu}\, \{\zeta\} = \left[\sum_{\mu} \Gamma_{1\mu\pi}\, \{\lambda\} \otimes \{\mu\}\right]\left[\sum_{\gamma} \Gamma_{1\gamma\lambda}\, \{\gamma\}\right]$$

et si π est une partition en 1 part, on a

$$8 \quad \sum_{\zeta,\nu} \Gamma_{1\zeta\nu} \{\zeta\} = \{\lambda\} \otimes \{\pi-1\} \left[\sum_{\gamma} \Gamma_{1\gamma\lambda} \{\gamma\}\right]$$

si λ est aussi une partition en 1 part

$$9 \quad \sum_{\zeta,\nu} \Gamma_{1\zeta\nu} \{\zeta\} = (\{\lambda\} \otimes \{\pi-1\})(\{\lambda-1\})$$

si (λ) est une partition de r et si

$\{\lambda\} \otimes \{\mu\} = \Sigma \{\nu\}$ alors

$$10 \quad \{\bar{\lambda}\} \otimes \{\mu\} = \Sigma \{\bar{\nu}\} \quad \text{si } r \text{ est pair}$$

$$11 \quad \{\bar{\lambda}\} \otimes \{\bar{\mu}\} = \Sigma \{\bar{\nu}\} \quad \text{si } r \text{ est impair} \quad .$$

D'autre part, si n est un entier on a les relations

$$12 \quad \{n\} \otimes \{2\} = \{2n\} + \{2n-2,2\} + \{2n-4,4\} + \ldots$$

avec $\frac{(n+1)}{2}$ ou $\frac{(n+2)}{2}$ termes

$$13 \quad \{n\} \otimes \{1^2\} = \{2n-1,1\} + \{2n-3,3\} + \ldots \quad (n+1)/2 \text{ ou } n/2 \text{ termes.}$$

D'après les relations 10 et 11 on a aussi

si n est impair

$$14 \quad \{1^n\} \otimes \{2\} = \{2^1,1^{2n-2}\} + \{2^3,1^{2n-6}\} + \ldots$$

$$15 \quad \{1^n\} \otimes \{1^2\} = \{1^{2n}\} + \{2^2,1^{2n-4}\} + \{2^4,1^{2n-8}\} - \ldots$$

$\Big\}(n+1)/2$ termes

si n est pair

$$16 \quad \{1^n\} \otimes \{2\} = \{1^{2n}\} + \{2^2,1^{2n-4}\} + \{2^4,1^{2n-8}\} + \ldots \quad (n+2)/2 \text{ termes}$$

$$17 \quad \{1^n\} \otimes \{1^2\} = \{2^1,1^{2n-2}\} + \{2^3,1^{2n-6}\} + \{2^5,1^{2n-10}\} + \ldots n/2 \text{ termes}$$

Enfin, on a les résultats généraux suivants en notant $\{\lambda\}$ une fonction S quelconque et $\{n\}$ une fonction S correspondant à 1 partition en 1 partie n

18 $\{\lambda\} \otimes \{1\} = \{1\} \otimes \{\lambda\} = \{\lambda\}$

19 $\{0\} \otimes \{n\} = \{\lambda\} \otimes \{0\} = \{0\}$

20 $\{0\} \otimes \{\lambda\} = 0$ si (λ) est une partition en plus d'une partie

21 $\{2\} \otimes \{n\} = \Sigma \{\mu\}$ de toutes les partitions (μ) de $2n$ en parties paires

22 $\{1^2\} \otimes \{n\} = \Sigma \{\bar{\mu}\}$

Degré d'un pléthysme.

Le développement du pléthysme $\{\lambda\} \otimes \{\mu\} = \Sigma \{\nu\}$ peut être vérifié en comparant le degré $f^{(\{\lambda\}\otimes\{\mu\})} = \frac{(mn)!}{(m!)^n n!} (f^{\{\lambda\}})^n f^{\{\mu\}}$ du pléthysme où m et n sont les poids des partitions (λ) et (μ) et $f^{\{\lambda\}}$ et $f^{\{\mu\}}$ les degrés des représentations $\{\lambda\}$ et $\{\mu\}$ des groupes symétriques d'ordre m! et n!

avec $f^{(\{\lambda\}\otimes\{\mu\})} = \Sigma f^{\{\nu\}}$.

V) Evaluation du pléthysme $[\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}$.

La relation (4) permet d'écrire :

$$P = [\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\} = \sum_{\mu\nu 3} (\{42\}\otimes\{\mu\})(\{21\}\otimes\{\nu\})\,\Gamma_{\mu\nu 3} \quad .$$

Dans le produit extérieur $\{\mu\}\{\nu\} = \Sigma\,\Gamma_{\mu\nu\lambda}\{\lambda\}$ si $\{\lambda\} = \{3\}$ les seules possibilités pour $\{\mu\}$ et $\{\nu\}$ telles que $(\mu+\nu) = 3$ sont

μ	ν
3	0
2	1
1	2
0	3

avec $\Gamma_{\mu\nu 3} = 1$ et on obtient, en tenant compte des relations (18) et (19)

$$\boxed{P = \{42\}\otimes\{3\} + [\{42\}\otimes\{2\}]\,\{21\} + [\{21\}\otimes\{2\}]\,\{42\} + \{21\}\otimes\{3\}} \qquad (a)$$

1°) Calcul de $\{21\}\otimes\{2\}$.

On exprime $\{21\}$ en fonction de partitions à 1 partie et on utilise la relation (5)

$$\{21\}\otimes\{2\} = [\underbrace{\{2\}\{1\}}_{A} - \{3\}]\otimes\{2\} = \sum \Gamma_{\mu\nu 2}(-1)^r\,(A\otimes\{\mu\})(\{3\}\otimes\{\bar{\nu}\})$$

$$= (A\otimes\{2\})(\{3\}\otimes\{0\}) - (A\otimes\{1\})(\{3\}\otimes\{1\}) + (A\otimes\{0\})(\{3\}\otimes\{1^2\})$$

$$= (\{2\}\{1\})\otimes\{2\} - \{2\}\{1\}\{3\} + \{3\}\otimes\{1^2\}$$

$$= (\{2\}\{1\})\otimes\{2\} - \{2\}\{1\}\{3\} + \{51\} + \{3^2\} \qquad (b)$$

$$(\{2\}\{1\}) \otimes \{2\} = \Sigma\, g_{\mu\circ\nu\supset 2}\, (\{2\} \otimes \{\mu\})(\{1\} \otimes \{\nu\})$$

$\{2\}$ peut venir du produit intérieur $2\circ 2$ ou $1^2\circ 1^2$ avec $g_{\mu\circ\nu,2}=1$

$$= (\{2\}\otimes\{2\})(\{1\}\otimes\{2\}) + (\{2\}\otimes\{1^2\})(\{1\}\otimes\{1^2\})$$

$$= \{4\}\{2\} + \{2^2\}\{2\} + \{31\}\{1^2\}$$

(b) s'exprime maintenant en fonction d'une somme de produits extérieurs de fonctions S et on obtient finalement

$$\underline{\{21\} \otimes \{2\}} = \underset{5}{\{2^3\}} + \underset{16}{\{321\}} + \underset{9}{\{42\}} + \underset{10}{\{31^3\}} \qquad (c)$$

Vérification des dimensions dans S_n.

Les dimensions des représentations des groupes S_n sont tabulés dans le livre de Wybourne et Butler (1970) pour $n \leqslant 14$.

D'autre part $f^{\{21\}\otimes\{2\}} = \dfrac{6!}{(3!)^2\ 2!}\ 2^2 \times 1 = 40 = \Sigma_\nu\, f^{(\nu)}$.

Réduction à SU_3 :

On ne conserve que les représentations correspondant à des partitions d'au plus 3 parties et on peut, pour les représentations $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\}$, enlever une constante soit λ_3 , ce qui donne $\{\lambda_1-\lambda_3\ ,\ \lambda_2-\lambda_3\}$

$[21]\otimes\{2\} = [42] + [21] + [00]$ ou en notation d'Elliott

$$\underline{(11)\otimes\{2\}} = (22) + (11) + (00) \qquad (d)$$

Vérification des dimensions dans SU_3 .

$\Sigma\, f^\nu = D[42] + D[21] + D[00] = 27 + 8 + 1 = 36$

D'autre part $[21]$ ayant la dimension 8 dans U_3 peut être considérée comme la représentation $\{1\}$ de U_8 . Dans U_8 le pléthysme s'écrit $\{1\}\otimes\{2\} = \{2\}$ et $\{2\}$ a bien la dimension 36 dans U_8 .

2°) Calcul de $\{42\} \otimes \{2\}$.

On peut écrire $\{42\} = \{4\}\{2\} - \{5\}\{1\} = A - B$

$$(A-B)\otimes\{2\} = \sum_{\mu\nu 2} (-1)^r \Gamma_{\mu\nu 2} (\{A\}\otimes\{\mu\})(\{B\}\otimes\{\bar{\nu}\})$$

$$= (A\otimes\{2\})(B\otimes\{0\}) - (A\otimes\{1\})(B\otimes\{1\}) + (A\otimes\{0\})(B\otimes\{1^2\})$$

$$= A\otimes\{2\} + B\otimes\{1^2\} - AB = (\{4\}\{2\})\otimes\{2\} + (\{5\}\{1\})\otimes\{1^2\}$$
$$- \{4\}\{2\}\{5\}\{1\}$$

$$\{4\}\{2\}\otimes\{2\} = \sum g_{\mu\nu\supset 2} (\{4\}\otimes\{\mu\})(\{2\}\otimes\{\nu\})$$
$$= (\{4\}\otimes\{2\})(\{2\}\otimes\{2\}) + (\{4\}\otimes\{1^2\})(\{2\}\otimes\{1^2\})$$

$$\{5\}\{1\}\otimes\{1^2\} = \sum g_{\mu\nu\supset 12} (\{5\}\otimes\{\mu\})(\{1\}\otimes\{\nu\})$$
$$= (\{5\}\otimes\{2\})(\{1\}\otimes\{1^2\}) + (\{5\}\otimes\{1^2\})(\{1\}\otimes\{2\})$$

$\{4\} \otimes \{2\} = \{8\} + \{62\} + \{4^2\}$ relation (12)

$\{2\} \otimes \{2\} = \{4\} + \{2^2\}$

$\{4\} \otimes \{1^2\} = \{71\} + \{53\}$ relation (13)

$\{2\} \otimes \{1^2\} = \{31\}$

$\{5\} \otimes \{2\} = \{10\} + \{82\} + \{64\}$

$\{5\} \otimes \{1^2\} = \{91\} + \{73\} + \{5^2\}$

$$\{42\} \otimes \{2\} = [\{8\} + \{62\} + \{4^2\}][\{4\} + \{2^2\}] + [\{71\} + \{53\}][\{31\}]$$
$$+ [\{10\} + \{82\} + \{64\}][\{1^2\}] + [\{91\} + \{73\} + \{5^2\}][\{2\}]$$
$$- [\{42\} + \{51\} + \{6\}][\{6\} + \{51\}] \quad .$$

Le pléthysme est maintenant sous forme d'une somme de produits extérieurs de fonctions S mais déjà on voit que les calculs sont très longs et les risques d'erreur, en regroupant les résultats, sont

non négligeables. Nous avons donc utilisé le programme de calcul et de rangement des fonctions de produits de Kronecker et obtenu finalement :

$$\underline{\{42\}\otimes\{2\}} = \{4422\}+\{444\}+\{5331\}+\{5421\}+\{543\}+\{5511\}+\{6222\}+\{6321\}$$
$$+2\{642\}+\{651\}+\{66\}+\{7311\}+\{732\}+\{741\}+\{822\}+\{84\} \qquad (e)$$

$\Sigma f_\nu = 2640+462+4158+5775+2112+1485+1925+5632+2\times 2673+1155+132+2376$
$+1925+1408+616+275 = 37422$ et on a bien

$$f^{(\{42\}\otimes\{2\})} = \frac{12!\ 9^2\times 1}{6!\ 6!\ 2!} = 37422 \ .$$

Réduction à SU_3.

$$[42]\otimes\{2\} = [444]+[543]+2[642]+[651]+[66]+[732]+[741]+[822]+[84]$$
$$= [00]+[21]+2[42]+[54]+[66]+[51]+[63]+[60]+[84]$$

ou en notation Elliott

$$\underline{(22)\otimes\{2\}} = (00)+(11)+2(22)+\begin{matrix}(14)\\(41)\end{matrix}+\begin{matrix}(06)\\(60)\end{matrix}+(33)+(44) \qquad (f)$$

$$1 + 8 + 54 + 70 + 56 + 64 + 125 = 378 \ .$$

Or (22), de dimension 27 dans U_3, est donc équivalente à $\{1\}$ de U_{27} et on a $\{1\}\otimes\{2\} = \{2\}$ de U_{27} dimension $\frac{27\times 28}{2} = 378$.

3°) Calcul de $\{21\}\otimes\{3\}$.

$$\{21\}\otimes\{3\} = [\{2\}\{1\}-\{3\}]\otimes\{3\} = [A-\{3\}]\otimes\{3\} = \Sigma\ (-1)^r\ \Gamma_{\mu\nu 3}\ (A\otimes\{\mu\})(\{3\}\otimes\{\bar\nu\})$$

$\{3\}$ peut venir de

μ	ν	$\bar\nu$	$(-1)^r$	$\Gamma_{\mu\nu 3}$
3	0	0	1	1
2	1	1	-1	1
1	2	1^2	1	1
0	3	1^3	-1	1

et on obtient

$$\{21\}\otimes\{3\} = (A\otimes\{3\})(\{3\}\otimes\{0\})-(A\otimes\{2\})(\{3\}\otimes\{1\})+(A\otimes\{1\})(\{3\}\otimes\{1^2\})$$
$$-(A\otimes\{0\})(\{3\}\otimes\{1^3\})$$
$$= (\{2\}\{1\})\otimes\{3\}-(\{2\}\{1\})\otimes\{2\})(\{3\})+(\{2\}\{1\})[\{51\}+\{3^2\}]$$
$$-[\{3^3\}+\{531\}+\{71^2\}+\{63\}]$$

$(\{2\}\{1\})\otimes\{2\}$ a été calculé précédemment $= \{4\}\{2\}+\{2^2\}\{2\}+\{31\}\{1^2\}$

$$(\{2\}\{1\})\otimes\{3\} = \Sigma\, g_{\mu\circ\nu} \supset 3\ (\{2\}\otimes\{\mu\})(\{1\}\otimes\{\nu\})$$

$\{21\}_\circ\{21\}$ donne $\{3\}$ une fois
$\{3\}_\circ\{3\}$ " "
$\{1^3\}_\circ\{1^3\}$ " "

$$(\{2\}\{1\})\otimes\{3\} = (\{2\}\otimes\{21\})(\{1\}\otimes\{21\})+(\{2\}\otimes\{3\})(\{1\}\otimes\{3\})$$
$$+(\{2\}\otimes\{1^3\})(\{1\}\otimes\{1^3\})$$

$$\{2\}\otimes\{21\} = \{2\}\otimes((\{2\}\{1\})-\{3\}) = \{2\}\otimes(\{2\}\{1\})-\{2\}\otimes\{3\}$$
$$= (\{2\}\otimes\{2\})(\{2\}\otimes\{1\})-\{2\}\otimes\{3\}$$
$$= (\{4\}+\{2^2\})\{2\}-\{6\}-\{42\}-\{2^3\} = \{51\}+\{42\}+\{321\}$$
$$(\{2\}\{1\})\otimes\{3\} = [\{51\}+\{42\}+\{321\}]\{21\}+[\{6\}+\{42\}+\{2^3\}]\{3\}$$
$$+[\{41^2\}+\{3^2\}]\{1^3\}\ .$$

Il vient maintenant pour $\{21\}\otimes\{3\}$

$$\{21\}\otimes\{3\} = [\{51\}+\{42\}+\{321\}]\{21\}+[\{6\}+\{42\}+\{2^3\}]\{3\}+[\{41^2\}+\{3^2\}]\{1^3\}$$
$$- [\{42\}+\{51\}+\{6\}+\{2^3\}+\{321\}+\{42\}+\{31^3\}+\{321\}+\{41^2\}+\{42\}]\{3\}$$
$$+ [\{21\}+\{3\}][\{51\}+\{3^2\}]$$
$$- [\{3^3\}+\{531\}+\{71^2\}+\{63\}]\ . \qquad (g)$$

Cette expression est calculable par le programme et on obtient finalement :

$$\{21\}\otimes\{3\} = \{63\}+\{521\}+\{52^2\}+\{521^2\}$$
$$+ \{4^3 1\}+\{532\}+\{431^2\}+2\{42^2 1\}+\{421^3\}+\{41^5\}$$
$$+ \{3^3\}+\{3^2 21\}+\{3^2 1^3\}+\{32^3\}+\{32^2 1^2\}\ .$$

Vérification des dimensions dans S_n :

$$\frac{9!}{(3!)^3\ 3!}(2)^3 = 2240 = 48+162+120+189+84+168+216+2(216)+189+42+120$$
$$+56+84+162+168 .$$

Réduction à SU_3 :

$$[21]\otimes\{3\} = [63]+[531]+[522]+[441]+[432]+[333]$$

$$= [63]+[42]+[30]+[33]+[21]+[00] \quad \text{ou en notation d'Elliott}$$

$$(11)\otimes\{3\} = (33)+(22)+\underset{(03)}{(30)}+(11)+(00) \qquad (h)$$

Σ dimensions $= 64+27+2\times10+8+1 = 120$

(11) est de dimension 8 donc équivalente à $\{1\}$ de U_8 .

$$\{1\}\otimes\{3\} = \{3\} \quad \text{dimension 120 dans } U_8 .$$

4°) Calcul de $\{42\}\otimes\{3\}$.

$$\{42\} = \{4\}\{2\}-\{5\}\{1\} = A-B$$

$$(A-B)\otimes\{3\} = \Sigma\,(-1)^r\,\Gamma_{\mu\nu 3}\,(A\otimes\{\mu\})(B\otimes\{\bar{\nu}\})$$

$$= [\{A\}\otimes\{3\}][\{B\}\otimes\{0\}]-[\{A\}\otimes\{2\}][\{B\}\otimes\{1\}]+[\{A\}\otimes\{1\}][\{B\}\otimes\{1^2\}]$$
$$-[\{A\}\otimes\{0\}][\{B\}\otimes\{3\}]$$

$$= \{A\}\otimes\{3\}-[\{A\}\otimes\{2\}]\{B\}+\{A\}[\{B\}\otimes\{1^2\}]-\{B\}\otimes\{1^3\}$$

$$= (\{4\}\{2\})\otimes\{3\}-(\{4\}\{2\})\otimes\{2\})\{5\}\{1\}+\{4\}\{2\}[\{5\}\{1\}\otimes\{1^2\}]$$
$$-(\{5\}\{1\})\otimes\{1^3\}$$

On a vu que

$$[\{4\}\{2\}]\otimes\{2\} = [\{8\}+\{62\}+\{4^2\}][\{4\}+\{2^2\}]+[\{71\}+\{53\}]\{31\}$$

et que

$$[\{5\}\{1\}]\otimes\{1^2\} = [\{10\}+\{82\}+\{64\}]\{1^2\}+[\{91\}+\{73\}+\{5^2\}]\{2\} \quad .$$

D'autre part

$$(\{4\}\{2\})\otimes\{3\} = \Sigma\, g_{\mu\circ\nu\supset 3}\ (\{4\}\otimes\{\mu\})(\{2\}\otimes\{\nu\}) \qquad (i)$$

$$(\{5\}\{1\})\otimes\{1^3\} = \Sigma\, g'_{\mu'\circ\nu'\supset 1^3}\ (\{5\}\otimes\{\mu\})(\{1\}\otimes\{\nu\}) \quad . \qquad (j)$$

D'après la table des caractères de S_3

S_3			
$\{3\}$	1	1	1
$\{21\}$	2	0	-1
$\{1^3\}$	1	-1	1

on a $\{3\}\circ\{3\} = \{3\}$

$\{3\}\circ\{21\} = \{21\}$

$\{3\}\circ\{1^3\} = \{1^3\}$

$\{21\}\circ\{21\} = \{3\}+\{21\}+\{1^3\}$

$\{21\}\circ\{1^3\} = \{21\}$

$\{1^3\}\circ\{1^3\} = \{3\}$

On a donc

$$\{3\} \subset \left|\begin{array}{l} \{3\}\circ\{3\} \\ \{21\}\circ\{21\} \\ \{1^3\}\circ\{1^3\} \end{array}\right.$$

et

$$\{1^3\} \subset \left|\begin{array}{l} \{3\}\circ\{1^3\} \\ \{1^3\}\circ\{3\} \\ \{21\}\circ\{21\} \end{array}\right.$$

Les expressions (i) et (j) s'écrivent donc respectivement

$$\{4\}\{2\}\otimes\{3\} = (\{4\}\otimes\{3\})(\{2\}\otimes\{3\})+(\{4\}\otimes\{21\})(\{2\}\otimes\{21\})$$
$$+(\{4\}\otimes\{1^3\})(\{2\}\otimes\{1^3\})$$

$$\{5\}\{1\}\otimes\{1^3\} = (\{5\}\otimes\{3\})(\{1\}\otimes\{1^3\})+(\{5\}\otimes\{1^3\})(\{1\}\otimes\{3\})$$
$$+(\{5\}\otimes\{21\})(\{1\}\otimes\{21\})$$

On a d'après (18) $\{1\}\otimes\{\lambda\} = \{\lambda\}$

Soit : $\{1\}\otimes\{1^3\} = \{1^3\}$

$\{21\} = \{21\}$

$\{3\} = \{3\}$

On a déjà trouvé $\{2\}\otimes\{3\} = \{6\}+\{42\}+\{2^3\}$

$\{21\} = \{51\}+\{42\}+\{321\}$

$\{1^3\} = \{41^2\}+\{3^2\}$.

Les mêmes procédés permettent de déterminer les pléthysmes

$\{4\}\otimes\{3\}$ et $\{5\}\otimes\{3\}$ qui sont donnés un peu plus loin

$\otimes\{21\}$ $\otimes\{21\}$ sous forme de tables.

$\otimes\{1^3\}$ $\otimes\{1^3\}$

Le pléthysme $\{42\}\otimes\{3\}$ s'écrit maintenant :

$$\{42\}\otimes\{3\} = +(\{4\}\otimes\{3\})(\{2\}\otimes\{3\})+(\{4\}\otimes\{21\})(\{2\}\otimes\{21\})+(\{4\}\otimes\{1^3\})(\{2\}\otimes\{1^3\})$$
$$-[(\{8\}+\{62\}+\{4^2\})(\{4\}+\{2^2\})+(\{71\}+\{53\})\{31\}]\{5\}\{1\}$$
$$+[(\{10\}+\{82\}+\{64\})\{1^2\}+(\{91\}+\{73\}+\{5^2\})\{2\}]\{4\}\{2\}$$
$$-[(\{5\}\otimes\{3\})\{1^3\}+(\{5\}\otimes\{1^3\})\{3\}+(\{5\}\otimes\{21\})\{21\}] \quad .$$

En remplaçant les pléthysmes par leur développement on obtient une très longue somme de produits de Kronecker $\pm(\sum_i \lambda_i)(\sum_j \lambda_j)(\sum_k \lambda_k)$ qui peuvent alors être calculés et ordonnés par le programme FNKRON .

Le développement final de $\{42\}\otimes\{3\}$ s'exprime en fonction des représentations du groupe S_{18} et est donné sous forme de table.

Dans S_{18} la vérification des dimensions donne

$$f(\{42\}\otimes\{3\}) = \frac{18!\ 9^3 \times 1}{6!\ 6!\ 6!\ 3!} = 2\ 084\ 106\ 024 = \sum_\nu f_\nu \quad .$$

Réduction à SU_3 de $\{42\}\otimes\{3\}$.

On ne conserve que les représentations d'au plus 3 parties, il vient:

$$\{12,6\}+\{12,4,2\}+\{11,6,1\}+2\{11,5,2\}+\{11,4,3\}+\{10,8\}+2\{10,7,1\}+4\{10,6,2\}$$
$$+3\{10,5,3\}+3\{10,4^2\}+\{981\}+3\{972\}+6\{963\}+3\{954\}+3\{8^2 2\}+3\{873\}$$
$$+7\{8,6,4\}+2\{85^2\}+2\{7^2 4\}+2\{765\}+2\{6^3\} \quad .$$

Après soustraction d'une constante on obtient finalement :

$$[42]\otimes\{3\} = [12,6]+[10,2]+[10,5]+[10,8]+2[9,3]+2[9,6]+[8,1]+4[8,4]$$
$$+ [8,7]+3[72]+3[75]+3[6]+6[63]+3[6^2]+3[51]+3[54]+7[42]+2[3]$$
$$+ 2[3^2]+2[21]+2[0]$$

soit en notation d'Elliott

$$\underline{(22)\otimes\{3\}} = 2(00)+2(11)+7(22)+2(30)+6(33)+3(41)+4(44)+3(52)+(55)$$
$$2(03) \qquad 3(14) \qquad 3(25)$$
$$+ 3(60)+2(63)+(66)+(71)+(82)$$
$$3(06) \; 2(36) \qquad (17) \; (28) \quad .$$

Vérifications $\sum_\nu f_\nu = 3654$

$\{42\}$ dimension 27 dans $SU_3 \equiv [1]$ de U_{27}

$[1]\otimes\{3\} = [3]$ de U_{27} $\quad D_{[\lambda]} = G_n^{[\lambda]} / H_{[\lambda]}$ avec $G = \pi_{i,j}(n+i-j)$

$$D_{[3]} = \frac{27\times 28\times 29}{2\times 3} = 3654 \quad .$$

5°) Le pléthysme $[\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}$ s'exprime maintenant en fonction de pléthysmes connus

$$P = \{42\}\otimes\{3\} + [\{42\}\otimes\{2\}]\{21\} + [\{21\}\otimes\{2\}]\{42\} + \{21\}\otimes\{3\}$$

$$P = \{42\}\otimes\{3\} + \quad (a) \quad + \quad (b) \quad - \quad (c)$$

a) $[\{42\}\otimes\{2\}]\{21\} = [\{4^2 2^2\}+\{4^3\}+\{53^2 1\}+\{5421\}+\{543\}+\{5^2 1^2\}+\{62^3\}+\{6321\}$

$+2\{642\}+\{651\}+\{66\}+\{731^2\}+\{732\}+\{741\}+\{82^2\}+\{84\}]\{21\}$

b) $[\{21\}\otimes\{2\}]\{42\} = [\{42\}+\{321\}+\{31^3\}+\{2^3\}]\{42\}$.

On a donné à calculer, ordonner et vérifier l'expression

$$A = (a)+(b)+(c) = [\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}-\{42\}\otimes\{3\} \quad .$$

Les résultats sont donnés un peu plus loin sous forme de listing machine.

Réduction à SU_3 de $[\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}-\{42\}\otimes\{3\}$.

En ne gardant que les partitions en 3 parties au plus on obtient

$[3^3]+[432]+[4^2 1]+[4^3]+[52^2]+[531]+3[543]+2[5^2 2]+[5^3]+[63]+2[63^2]$

$+6[642]+3[651]+5[654]+[6^2]+4[6^2 3]+3[732]+3[741]+4[74^2]+[75]+8[753]$

$+6[762]+2[7^2 1]+[82^2]+[831]+[84]+6[843]+7[852]+4[861]+[87]+2[93^2]+4[942]$

$+3[951]+[96]+[10,3,2]+[10,4,1]+[10,5]$

soit

$3[0]+9[21]+7[3]+7[33]+15[42]+9[51]+9[54]+3[6]+11[63]+3[66]+5[72]$

$+5[75]+[81]+[87]+4[84]+[96]+[93]+[10,5]$

soit en notation d'Elliott

$$A = \begin{matrix} 3(00)+9(11)+7(30)+15(22)+9(41)+3(60)+11(33)+5(52)+(71)+4(44)+(36)+(55) \\ \qquad\qquad 7(03) \qquad\quad 9(14)\ 3(06) \qquad\quad 5(25)\ (17) \qquad\quad (63) \end{matrix}$$

Finalement en regroupant les résultats de $A = [\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}-\{42\}\otimes\{3\}$

et ceux de $[\{42\}\otimes\{3\}]$ on trouve

pour le pléthysme $[\{42\}+\{21\}]\otimes\{3\}$, ou en notation d'Elliott

$[(22)+(11)]\otimes\{3\}$, les résultats suivants :

$$[(22)+(11)]\otimes\{3\} = \begin{matrix} 5(00)+11(11)+22(22)+9(30)+17(33)+12(41)+8(44) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\quad 9(03) \qquad\quad 12(14) \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} +8(52)+2(55)+6(60)+3(63)+(66)+2(71)+(82) \\ 8(25) \qquad 6(06)\ 3(36) \qquad 2(17)\ (28) \end{matrix}$$

Vérification des dimensions $\sum_\nu f_\nu = 7770$ dans SU_3

$(22) \otimes \{3\} \rightarrow 3654$

$(11) \otimes \{3\} \rightarrow 120$

$P = (22) \otimes \{2\} \rightarrow 378$ $\qquad P \times (11) \rightarrow 378 \times 8 = 3024$

$Q = (11) \otimes \{2\} \rightarrow 36$ $\qquad Q \times (22) \rightarrow 36 \times 27 = 972$

7770

Notons qu'un certain nombre des résultats intermédiaires ont été publiés par divers auteurs, Ibrahim (1958), King (1971, 1974), Plunkett (1971, 1972), Butler (1970, 1971) mais les tables de pléthysmes $\{\mu\}\otimes\{\lambda\}$, où μ et λ sont des partitions des entiers m et n , sont incomplètes à partir de $mn=18$ et ne traitent que les cas $(\lambda) = (2)$ ou (11) . On ne trouve donc pas, notamment, le pléthysme $\{42\} \otimes \{3\}$ ni les dimensions des représentations de S_{18} nécessaires aux vérifications.

Dimension des représentations de S_{12} et table des pléthysmes $\{4\}\otimes\{3\}$, $\{4\}\otimes\{2,1\}$, $\{4\}\otimes\{1^3\}$

$\{\nu\}$	f_ν	$\{4\}^3$	$\{4\}\otimes\{3\}$	$\{4\}\otimes\{2,1\}$	$\{4\}\otimes\{1^3\}$
$\{12\}$	1	1	1	0	0
$\{11,1\}$	11	2	0	1	0
$\{10,2\}$	54	3	1	1	0
$\{10,1,1\}$	55	1	0	0	1
$\{9,3\}$	154	4	1	1	1
$\{9,2,1\}$	320	2	0	1	0
$\{8,4\}$	275	5	1	2	0
$\{8,3,1\}$	891	3	0	1	1
$\{8,2,2\}$	616	1	1	0	0
$\{7,5\}$	297	3	0	1	1
$\{7,4,1\}$	1408	4	1	1	1
$\{7,3,2\}$	1925	2	0	1	0
$\{6,6\}$	132	1	1	0	0
$\{6,5,1\}$	1155	2	0	1	0
$\{6,4,2\}$	2673	3	1	1	0
$\{6,3,3\}$	1650	1	0	0	1
$\{5,5,2\}$	1320	1	0	0	1
$\{5,4,3\}$	2112	2	0	1	0
$\{4^3\}$	462	1	1	0	0

On vérifie que $\{\lambda\}^n = \sum_\nu f_\nu \{\lambda\}\otimes\{\nu\}$ où $\{\nu\}$ sont les partitions de n et f_ν le degré de la représentation $\{\nu\}$ dans S_n

C'est-à-dire $\{4\}^3 = \{4\}\otimes\{3\}+2\times\{4\}\otimes\{21\}+\{4\}\otimes\{1^3\}$.

D'autre part on vérifie les dimensions de chaque pléthysme par

$$f(\{\lambda\}\otimes\{\mu\}) = \left(\frac{f_\lambda}{m!}\right)^n \frac{f_\mu}{n!}\,(mn!) = \sum_\nu f_\nu \quad .$$

Dimension des représentations de S_{15} et table des plethysmes $\{5\}\otimes\{3\}$, $\{5\}\otimes\{21\}$, $\{5\}\otimes\{1^3\}$

$\{\nu\}$	f_ν	$\{5\}^3$	$\{5\}\otimes\{3\}$	$\{5\}\otimes\{21\}$	$\{5\}\otimes\{1^3\}$
15	1	1	1	0	0
14,1	14	2	0	1	0
13,2	90	3	1	1	0
13,1,1	91	1	0	0	1
12,3	350	4	1	1	1
12,2,1	715	2	0	1	0
11,4	910	5	1	2	0
11,3,1	2835	3	0	1	1
11,2,2	1925	1	1	0	0
10,5	1638	6	1	2	1
10,4,1	7007	4	1	1	1
10,3,2	9100	2	0	1	0
9,6	2002	4	1	1	1
9,5,1	11375	5	0	2	1
9,4,2	22113	3	1	1	0
$9,3^2$	12740	1	0	0	1
8,7	1430	2	0	1	0
8,6,1	M583	3	1	1	0
8,5,2	32032	4	1	1	1
8,4,3	35035	2	0	1	0
$7^2 1$	5005	1	0	0	1
762	25025	2	0	1	0
753	45045	3	0	1	1
74^2	25025	1	1	0	0
$6^2 3$	21450	1	1	0	0
654	30030	2	0	1	0
5^3	6006	1	0	0	1

Dimension des représentations de S_{18} et plethysme $\{42\} \otimes \{3\}$

$\{\nu\}$	f_ν	$\{42\}\otimes\{3\}$
18	1	0
17,1	17	0
16,2	135	0
$16,1^2$	136	0
15,3	665	0
15,2,1	1344	0
$15,1^3$	680	0
14,4	2244	0
14,3,1	6885	0
$14,2^2$	4641	0
$14,2,1^2$	7020	0
$14,1^4$	2380	0
13,5	5508	0
13,4,1	22848	0
13,3,2	29172	0
$13,3,1^2$	35343	0
$13,2^2,1$	29835	0
$13,2,1^3$	24192	0
$13,1^5$	6188	0
12,6	9996	1
12,5,1	53040	0
12,4,2	99144	1
$12,4,1^2$	111384	0
$12,3^2$	56100	0
12,3,2,1	182784	0

$\{\nu\}$	f_ν	$\{42\}\otimes\{3\}$
$12,3,1^3$	116025	0
$12,2^3$	58344	1
$12,2^2,1^2$	106029	0
$12,2,1^4$	60060	0
11,7	13260	0
11,6,1	88128	1
11,5,2	219912	2
$11,5,1^2$	238680	1
11,4,3	228480	1
11,4,2,1	583440	2
$11,4,1^3$	339456	0
$11,3^2,1$	358020	1
$11,3,2^2$	363528	1
$11,3,2,1^2$	612612	1
$11,3,1^4$	268515	0
$11,2^3,1$	251328	0
$11,2^2,1^3$	255255	0
10,8	11934	1
10,7,1	102102	2
10,6,2	331500	4
$10,6,1^2$	353430	1
10,5,3	501228	3
10,5,2,1	1175040	5
$10,5,1^3$	656370	1
$10,4^2$	259896	3

$\{\nu\}$	f_ν	$\{42\}\otimes\{3\}$
10,4,3,1	1349460	4
$10,4,2^2$	1099560	5
$10,4,2,1^2$	1790100	2
$10,4,1^4$	714714	1
$10,3^2,2$	848232	1
$10,3^2,1^2$	1145664	2
$10,3,2^2,1$	1458600	2
$10,3,2,1^3$	1357824	0
$10,2^4$	302940	1
$10,2^3,1^2$	612612	0
9^2	4862	0
9,8,1	70720	1
9,7,2	322218	3
$9,7,1^2$	340340	3
9,6,3	678912	6
9,6,2,1	1531530	7
$9,6,1^3$	837760	2
9,5,4	649740	3
9,5,3,1	2625480	10
$9,5,2^2$	1989000	6
$9,5,2,1^2$	3180870	5
$9,5,1^4$	1215500	0
$9,4^2,1$	1429428	5
9,4,3,2	2970240	7
$9,4,3,1^2$	3877632	5

$\{\nu\}$	f_ν	$\{\nu\}\otimes\{2,1^4\}$
9421	3965760	5
9413	3544398	1
933	779688	2
9321	3198720	3
931^3	2333760	1
932^3	1649340	2
9321^2	3222180	1
921^6	875160	0
81^2	136136	3
81^4	143208	0
873	540540	3
8721	1131520	6
871^3	612612	1
864	787644	7
8631	2923830	10
862^2	2148120	9
8621^2	3403400	5
861^4	1272348	1
85^2	408408	2
8541	3055104	10
8532	5012280	11
8531^2	6431428	9
852^21	4126120	7
8521^3	5361664	2
84^22	3007368	9

$\{\nu\}$	f_ν	$\{\nu\}\otimes\{2,1^4\}$
84^21^2	3646500	3
843^2	2598960	3
84321	9801792	10
8431^3	6872250	2
842^3	3378[illegible]0	4
842^21^2	7634088	1
83^31	2858856	2
83^22^2	3508536	1
83^221^2	6361740	2
831^31	4230144	1
82^5	659736	1
7^24	364650	2
7^231	1312740	6
7^22^2	952852	1
7^221^2	1503684	3
7^21^4	556920	0
765	466752	2
7641	2756754	9
7632	4200768	10
7631^2	5346432	7
762^21	4950400	6
7621^3	4288284	1
75^21	1575288	5
7542	5250960	10
7541^2	6265350	8

$\{\nu\}$	f_ν	$\{\nu\}\otimes\{2,1^4\}$
753^2	3675672	7
75321	13366080	12
7531^3	9189180	2
751^3	5022280	3
75^21^2	8529520	1
74^23	2858856	5
74^221	8486400	7
74^21^3	5469750	2
743^21	8019648	5
7432^2	9165312	5
74321^2	16326320	3
742^31	8576568	2
73^32	3508596	1
73^31^2	51051000	1
73^22^21	7876440	1
6^3	87516	2
6^251	1011020	2
6^249	2756754	8
6^241^2	3267264	3
6^23^2	1823250	2
6^2321	6534528	5
6^231^3	4455360	2
6^22^3	2382380	3
$6^22^21^2$	1511052	0
65^22	2042040	3

$\{\nu\}$	f_ν	{[illegible]} $\otimes$ {3}
65^21^2	2362932	3
6543	3734016	5
65421	10720710	9
6541^3	6789120	1
653^21	8270262	5
6532^2	9189180	4
65321^2	16243500	4
652^31	7920640	1
64^3	1021020	3
64^231	7088796	4
64^22^2	6534528	5
64^221^2	11277630	1
643^22	7876440	2
643^21^2	11277630	2
6432^21	16243500	2
642^4	4511052	1
63^4	1429428	1
5^33	875160	2
5^321	2333760	1
5^31^3	1429428	1
5^24^2	787644	0
5^2431	5105100	4
5^242^2	4594590	1
5^2421^2	7876440	2
5^23^22	4594590	2
$5^23^21^2$	6534528	0
5^232^21	9189180	1
54^31	1867008	1
54^232	5105100	2
54^231^2	7088796	1
54^22^21	8270262	1
543^221	10720710	1
4^42	787644	1
4^32^3	1823250	1

Plethysme $A = [\{42\} + \{21\}] \otimes \{3\} - \{42\} \otimes \{3\}$

$[3_{2211}] + [3_{222}] + [3_{3111}] + [3321] + [333] + [4_{11111}] + [42_{111}] + 2\cdot[4221] + [42222] + [431_1] + [432] +$
$[4321_{11}] + 2\cdot[43221] + 2\cdot[4331_1] + [4332] + [441] + [4411_{11}] + 2\cdot[44211] + 3\cdot[4422] + [44221] + 2\cdot[4431] +$
$[44321_1] + [44322] + [44331] + [4443] + 2\cdot[44421] + [4443] + [5_{211}] + [522] + [52211_1] + 2\cdot[52221] + [531] +$
$[53111] + 5\cdot[5321_1] + 4\cdot[5322] + 4\cdot[5331] + [53321_1] + [53322] + [53331] + 3\cdot[5411_1] + 7\cdot[5421] + 2\cdot[54221_1] +$
$2\cdot[54222] + 3\cdot[543] + 2\cdot[5431_{11}] + 7\cdot[54321] + 3\cdot[5433] + 4\cdot[5441_1] + 5\cdot[5442] + 3\cdot[55_{11}] + 2\cdot[552] + 2\cdot[5521_{11}]$
$4\cdot[55221] + 5\cdot[55311] + 6\cdot[5532] + 5\cdot[5541] + [555] + [621111] + 2\cdot[62211] + 3\cdot[6222] + [622221] + [63] +$
$3\cdot[6311_1] + 7\cdot[6321] + 2\cdot[63221_1] + 2\cdot[63222] + 2\cdot[6331] + 2\cdot[6_{3111}] + 5\cdot[63321] + 2\cdot[6333] + 4\cdot[6411] +$
$6\cdot[642] + 2\cdot[6421_{11}] + 8\cdot[64221] + 9\cdot[6431_1] + 11\cdot[6432] + 8\cdot[6441] + 3\cdot[651] + [6511_{11}] + 8\cdot[6521_1] + 8\cdot[6522] +$
$12\cdot[6531] + 5\cdot[654] + [66] + 2\cdot[661_{11}] + 7\cdot[6621] + 4\cdot[663] + [7_{211}] + 2\cdot[7221] + [72211_1] + [7_{2222}] + 3\cdot[731_1]$
$3\cdot[732] + 2\cdot[7321_{11}] + 6\cdot[73221] + 5\cdot[7331_1] + 6\cdot[7332] + 3\cdot[741] + [7411_{11}] + 9\cdot[7421_1] + 9\cdot[7422] + 13\cdot[7431] +$
$4\cdot[744] + [75] + 4\cdot[751_{11}] + 13\cdot[7521] + 8\cdot[753] + 5\cdot[761_1] + 6\cdot[762] + 2\cdot[771] + [822] + 2\cdot[82221] + [831] +$
$[8_{3111}] + 5\cdot[8321_1] + 5\cdot[8322] + 5\cdot[8331] + [84] + 3\cdot[841_{11}] + 11\cdot[8421] + 6\cdot[843] + 5\cdot[851_1] + 7\cdot[852] +$
$4\cdot[861] + [87] + [92211] + [9222] + [931_{11}] + 4\cdot[9321] + 2\cdot[933] + 3\cdot[941_1] + 4\cdot[942] + 3\cdot[951] + [96] +$
$[10221] + [1032] + [1041] + [105]$

APPENDICE II

Etude de $(d+s)^N$ à l'aide de la chaîne de réductions $U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$

L'utilisation du groupe SU_3 n'étant pas standard en physique atomique, nous donnons ici un aperçu sur la façon dont ont été obtenus les différents résultats utiles, en particulier le tenseur métrique, l'opérateur de Casimir, les éléments de matrice réduits des générateurs. Ces résultats ne sont pas originaux et ont déjà été obtenus par S. Feneuille et A. Crubellier, la méthode d'étude d'une chaîne de réductions a déjà été décrite par B. R. Judd pour les configurations ℓ^N et S. Feneuille pour les configurations $(\ell+\ell')^N$, mais il nous a semblé nécessaire, pour la compréhension de la thèse, de rassembler dans cet appendice les résultats utilisés au Chapitre II et de donner un aperçu sur la façon de les obtenir afin de bien préciser leur cohérence et permettre éventuellement toute vérification.

Enfin, je remercie vivement A. Crubellier d'avoir mis ses résultats à ma disposition.

Le plan général est le suivant :

I) Etude des configurations $(d+s)^N$ dans le schéma $U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$.

1°) U_{12} et SU_{12} .

2°) Réduction $SU_{12} \supset SU_2 \times SU_6$.

3°) Réduction $SU_6 \supset SU_3 \supset R_3$.

II) Etude de $SU_3(d+s) \supset R_3$.

1°) Tenseur métrique et opérateur de Casimir G_{SU_3} .

2°) Notation d'Elliott des représentations de SU_3 . Valeur propre de G_{SU_3} .

3°) Classification des générateurs de SU_3 et des opérateurs monoélectroniques.

4°) Calcul des éléments de matrice réduits des générateurs.

I) Etude des configurations $(d+s)^N$ dans le schéma $U_{12} \supset SU_{12} \supset SU_2 \times [SU_6 \supset SU_3 \supset R_3]$.

On a dit au Chapitre I que les $[4(\ell+\ell'+1)]^2$ opérateurs monoélectroniques $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell)$, $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell'\ell')$, $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell')$, $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell'\ell)$, agissant sur les $4(\ell+\ell'+1)$ états monoélectroniques $|s\ell m_\ell m_s\rangle$ d'une configuration $(\ell+\ell')^n$ peuvent être considérés comme les opérateurs infinitésimaux du groupe $U_{4(\ell+\ell'+1)}$, soit de U_{12} dans le cas $(d+s)^n$.
En effet :

1°) Etude de U_{12} et SU_{12} .

a) Ecrivons le commutateur des opérateurs .

Les $w^{\varkappa k}$ sont définis par leurs éléments de matrice réduits

$$\langle s\ell' \| w^{\varkappa k}(\ell_a \ell_b) \| s\ell \rangle = \delta(\ell_a \ell')\delta(\ell_b \ell)([\varkappa][k])^{\frac{1}{2}} \quad . \tag{1}$$

L'action de $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell_a \ell_b)$ sur un état donne

$$w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell_a \ell_b)|s\ell m_\ell m_s\rangle = \sum_{\ell' m'_s m'_\ell} \delta(\ell_a \ell')\delta(\ell_b \ell)([\varkappa][k])^{\frac{1}{2}} (-1)^{\ell'+s-m_{\ell'}-m_{s'}} \begin{pmatrix} s & \varkappa & s \\ -m'_s & \pi & m_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & k & \ell \\ -m'_\ell & q & m_\ell \end{pmatrix} |s\ell' m'_\ell m'_s\rangle$$

On a donc :

$$w^{\varkappa_1 k_1}_{\pi_1 q_1}(ab)\left(w^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(cd)|s\ell m_\ell m_s\rangle\right) = \sum_{\substack{\ell' m'_\ell m'_s \\ \ell'' m''_\ell m''_s}} \delta(\ell_c \ell')\delta(\ell_d \ell)\delta(\ell_a \ell'')\delta(\ell_b \ell')$$

$$(-1)^{\ell'+s-m'_{\ell'}-m'_{s'}+\ell''+s-m''_{\ell''}-m''_s} ([\varkappa_1][k_1][\varkappa_2][k_2])^{\frac{1}{2}} \tag{2}$$

$$\begin{pmatrix} s & \varkappa_2 & s \\ -m'_s & \pi_2 & m_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \varkappa_1 & s \\ -m''_s & \pi_1 & m'_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & k_2 & \ell \\ -m'_\ell & q_2 & m_\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell'' & k_1 & \ell' \\ -m''_\ell & q_1 & m'_\ell \end{pmatrix} |s\ell'' m''_\ell m''_s\rangle$$

On utilise 2 fois la formule (2-19) du livre Rotenberg afin d'exprimer d'une part la somme sur les parties de spin $\sum_{m'_s}$, d'autre part la somme $\sum_{m'_\ell}$, soit :

$$\sum_{m'_s}\begin{pmatrix} s & \varkappa_1 & s \\ -m''_s & \pi_1 & m'_s \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varkappa_2 & s & s \\ \pi_2 & m_s & -m'_s \end{pmatrix} = \sum_{\varkappa_3\pi_3} (-1)^{s+\varkappa_3-m''_s+\pi_2}[\varkappa_3]$$

$$\begin{Bmatrix} s & \varkappa_1 & s \\ \varkappa_2 & s & \varkappa_3 \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} \varkappa_2 & \varkappa_1 & \varkappa_3 \\ \pi_2 & \pi_1 & \pi_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s & s & \varkappa_3 \\ -m''_s & m_s & -\pi_3 \end{pmatrix}$$

$$\sum_{m'_\ell}\begin{pmatrix} \ell'' & k_1 & \ell' \\ -m''_\ell & q_1 & m'_\ell \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k_2 & \ell & \ell' \\ q_2 & m_\ell & -m'_\ell \end{pmatrix} = \sum_{k_3 q_3} (-1)^{\ell'+k_3-m''_\ell+q_2}[k_3]$$

$$\begin{Bmatrix} \ell'' & k_1 & \ell' \\ k_2 & \ell & k_3 \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} k_2 & k_1 & k_3 \\ q_2 & q_1 & q_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell'' & \ell & k_3 \\ -m''_\ell & m_\ell & -q_3 \end{pmatrix}$$

On reporte dans (2) et on obtient en changeant π_3 et q_3 en $-\pi_3$ et $-q_3$

$$\sum_{\substack{\ell''m''_\ell m''_s \\ k_3 q_3 \varkappa_3 \pi_3}} \delta(\ell_c \ell_b)\ (-1)^{\ell''+s-m''_\ell-m''_s+\varphi_1+\varphi_2}([\varkappa_1][k_1][\varkappa_2][k_2][\varkappa_3][k_3][\varkappa_3][k_3])^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{Bmatrix} \varkappa_1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ s & s & s \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} \varkappa_1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s & \varkappa_3 & s \\ -m''_s & \pi_3 & m_s \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell & \ell'' & \ell' \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \ell'' & k_3 & \ell \\ -m''_\ell & q_3 & m_\ell \end{pmatrix}|s\ell''m''_\ell m''_s>$$

avec $\varphi_1 = \ell'+s-q_2-m_\ell-\pi_2-m_s+s+\varkappa_3-m''_s+\pi_2+\ell'+k_3-m''_\ell+q_2$

$$\varphi_2 = \varkappa_1+\varkappa_2+\varkappa_3+k_1+k_2+k_3+2s+\varkappa_3+\ell''+\ell+k_3$$

On sait :

$$\begin{matrix} \varkappa_1 \varkappa_2 \\ \varkappa_3 \varkappa_3 \end{matrix}|\ell_a \ell_b||s\ell m_\ell m_s> = \sum_{\ell''m''_\ell m''_s} (-1)^{\ell''+s-m''_\ell-m''_s} \ldots\ldots |s\ell''m''_\ell\ m''_s> \quad .$$

Il vient après simplifications des phases :

$$w^{\nu_1 k_1}_{\pi_1 q_1}(\ell_a \ell_b)\, w^{\nu_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(\ell_c \ell_d) = \sum_{\substack{k_3 q_3 \\ \nu_3 \pi_3}} (-1)^{k_3+q_3+\nu_3+\pi_3+1}$$

$$([\nu_1][\nu_2][\nu_3][k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \nu_1 & \nu_2 & \nu_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \nu_1 & \nu_2 & \nu_3 \\ s & s & s \end{Bmatrix}$$

$$\left[\delta(\ell_b \ell_c)(-1)^{\ell_a+\ell_d+\nu_1+\nu_2+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_d & \ell_a & \ell_b \end{Bmatrix} \right] w^{\nu_3 k_3}_{\pi_3 q_3}(\ell_a \ell_d) \quad .$$

De même $w^{\nu_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(\ell_c \ell_d)\, w^{\nu_1 k_1}_{\pi_1 q_1}(\ell_a \ell_b)$ = même expression en changeant (1) $\rightleftarrows$ (2) et (ab) $\rightleftarrows$ (cd) .

Le commutateur s'écrit finalement :

$$\left[w^{\nu_1 k_1}_{\pi_1 q_1}(\ell_a \ell_b), w^{\nu_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(\ell_c \ell_d) \right] = \sum_{\substack{\nu_3 k_3 \\ \pi_3 q_3}} (-1)^{1+k_3+\nu_3+q_3+\pi_3}$$

$$([\nu_1][\nu_2][\nu_3][k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \nu_1 & \nu_3 & \nu_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \nu_1 & \nu_2 & \nu_3 \\ s & s & s \end{Bmatrix}$$

$$\left[\delta(\ell_b \ell_c)(-1)^{\ell_a+\ell_d+\nu_1+\nu_2+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_d & \ell_a & \ell_b \end{Bmatrix} w^{\nu_3 k_3}_{\pi_3 q_3}(\ell_a \ell_d) \right. \qquad (3)$$

$$\left. -\delta(\ell_a \ell_d)(-1)^{\ell_b+\ell_c+k_3+\nu_3} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_c & \ell_b & \ell_a \end{Bmatrix} w^{\nu_3 k_3}_{\pi_3 q_3}(\ell_c \ell_b) \right]$$

Cette expression est bien de la forme $[X_\rho, X_\sigma] = c^\tau_{\rho\sigma} X_\tau$, les $w^{\nu k}_{\pi q}$ sont les opérateurs infinitésimaux d'un groupe. En prenant $\ell_a, \ell_b, \ell_c, \ell_d = \ell$ ou ℓ' on trouve bien $n^2 = 16\,(\ell+\ell'+1)^2$ opérateurs

dont les éléments de matrice s'écrivent à l'aide de (1)

$$\langle s\ell' m'_s m'_\ell | w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell_a \ell_b) | s\ell'' m''_s m''_\ell \rangle =$$

$$= \delta(\ell_a \ell')\delta(\ell_b \ell'')(-1)^{\ell'+s-m''_\ell-m_s} \{[\varkappa][k]\}^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} s & \varkappa & s \\ -m'_s & \pi & m''_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & k & \ell'' \\ -m'_\ell & q & m''_\ell \end{pmatrix}$$

les relations d'orthogonalité des 3j assurant que les n^2 matrices de degré n sont linéairement indépendantes, les $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ sont bien les opérateurs infinitésimaux du groupe linéaire U_n (unitaire). On pourrait aussi vérifier que l'on peut former des combinaisons linéaires X_{ij} des $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ satisfaisant l'équation caractéristique des groupes U_n à savoir :

$$[X_{ik}, X_{mn}] = \delta_{km} X_{in} - \delta_{in} X_{mk} \quad .$$

b) Pour obtenir SU_{12} il faut enlever l'opérateur qui commute avec tous les autres. Il sera une combinaison linéaire de $w^{00}_{00}(dd)$ et $w^{00}_{00}(ss)$.

Les relations de commutation (3) donnent

$$[w^{00}_{00}(dd), w^{\varkappa k}_{\pi q}(dd)] = 0$$

$$[w^{00}_{00}(dd), w^{00}_{00}(ss)] = 0$$

$$[w^{00}_{00}(dd), w^{\varkappa 2}_{\pi q}(ds)] = \frac{1}{\sqrt{10}} w^{\varkappa 2}_{\pi q}(ds)$$

$$[\text{-------}, \text{---}(sd)] = -\frac{1}{\sqrt{10}} \text{----}(sd)$$

$$[w^{00}_{00}(ss), w^{\varkappa 2}_{\pi q}(ds)] = -\frac{1}{\sqrt{2}} w^{\varkappa 2}_{\pi q}(ds)$$

$$[\text{-------}.\text{---}(sd)] = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{----}(sd) \quad .$$

On en tire que $[\alpha w_{00}^{00}(dd)+\beta w_{00}^{00}(ss), w_{\pi q\,(sd)}^{\varkappa 2}(ds)] = \pm\left\{\frac{\alpha}{\sqrt{10}} - \frac{\beta}{\sqrt{2}}\right\} = 0$.

Donc l'opérateur $\frac{1}{\sqrt{6}}\left\{\sqrt{5}\ w_{00}^{00}(dd) + w_{00}^{00}(ss)\right\}$ commute avec tous les autres, on l'enlève et on ne conserve que la combinaison orthogonale.

Les générateurs de SU_{12} sont donc $\begin{cases} -\text{les } w_{\pi q}^{\varkappa k}(\ell_a \ell_b) \text{ sauf les } w_{\pi q}^{\varkappa k}(\ell_i \ell_i) \\ -\frac{1}{\sqrt{6}}\{w_{00}^{00}(dd) - \sqrt{5}\ w_{00}^{00}(ss)\} \end{cases}$

2°) Réduction $SU_{12} \supset SU_2 \times SU_6$.

a) SU_2 .

On examine les opérateurs de rang 0 par rapport à l'orbite

$$w_{\pi 0}^{10}(\ell_a \ell_b),\ \frac{1}{\sqrt{6}}\left\{w_{00}^{00}(dd) - \sqrt{5}\ w_{00}^{00}(ss)\right\}$$

et on cherche si on peut en extraire qui se transforment les uns dans les autres de façon à former un sous-groupe. Si, en plus, ils commutent avec tous les autres opérateurs du groupe ils forment un sous-groupe invariant.

On trouve à l'aide de (3) que

$$[w_{\pi_1 0}^{10}(\ell_a \ell_b), w_{\pi_2 0}^{10}(\ell_c \ell_d)] = \delta(\ell_a \ell_b \ell_c \ell_d) \sum_{\varkappa_3 \pi_3} (-1)^{1+\pi_3}\, 3\sqrt{[\varkappa_3]}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \varkappa_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & \varkappa_3 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \frac{1}{[\ell]} \left[1-(-1)^{\varkappa_3}\right] w_{\pi_3 0}^{\varkappa_3 0}(\ell_i \ell_i).$$

Si $\varkappa_3=0$ le commutateur est nul. Il reste $\varkappa_3=1$ soit :

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(\ell_a\ell_b), w^{10}_{\pi_2 0}(\ell_c\ell_d)] = \delta(\ell_a\ell_b\ell_c\ell_d) \sum_{\pi_3} (-1)^{1+\pi_3} 3\sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \frac{2}{2\ell+1} w^{10}_{\pi_3 0}(\ell\ell)$$

Le commutateur de 2 opérateurs de rang 0/orbite s'exprime en fonction d'opérateurs de rang 0/orbite. On a aussi :

$$[w^{10}_{\pi 0}(\ell_a\ell_b), w^{00}_{00}(\ell_i\ell_i)] = 0$$

Examinons les commutateurs de ces opérateurs avec les opérateurs restants $w^{\varkappa k}_{\pi q}$ de SU_{12} .

$$[w^{10}_{\pi 0}(\ell\ell), w^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(\ell_c\ell_d)] = \sum_{\varkappa_3\pi_3} (-1)^{1+k_2+\varkappa_3+\pi_3+q_2} \sqrt{3} ([\varkappa_2][\varkappa_3])^{\frac{1}{2}} [k_2] \begin{pmatrix} 1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ \pi_1 & \pi_2 & -\pi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & k_2 & k_2 \\ 0 & q_2 & -q_2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & \varkappa_2 & \varkappa_3 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} [\delta(\ell\ell_c)(-1)^{1+\varkappa_2+k_2} \begin{Bmatrix} 0 & k_2 & k_2 \\ \ell_d & \ell & \ell \end{Bmatrix} w^{\varkappa_3 k_2}_{\pi_3 q_2}(\ell\ell_d)$$

$$-\delta(\ell\ell_d)(-1)^{k_2+\varkappa_3} \begin{Bmatrix} 0 & k_2 & k_2 \\ \ell_c & \ell & \ell \end{Bmatrix} w^{\varkappa_3 k_2}_{\pi_3 q_2}(\ell\ell_c)] \quad .$$

Soit, sous une forme allégée :

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(\ell\ell), w^{\varkappa_2 k_2}_{\pi_2 q_2}(\ell_c\ell_d)] = \sum A(\pi_1, \varkappa_2\pi_2 k_2 q_2, \varkappa_3\pi_3) [\ell]^{-\frac{1}{2}} (\delta(\ell\ell_c)(-1)^{1+\varkappa_2} w^{\varkappa_3 k_2}_{\pi_3 q_2}(\ell\ell_d) - \delta(\ell\ell_d)(-1)^{\varkappa_3} w^{\varkappa_3 k_2}_{\pi_3 q_2}(\ell\ell_c)) \quad .$$

On a les 4 cas possibles :

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(dd), w^{\varkappa_2 2}_{\pi_2 q_2}(ds)] = \sum_{\varkappa_3\pi_3} A(\pi_1, \varkappa_2\pi_2, 2q_2, \varkappa_3\pi_3) \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{(-1)^{1+\varkappa_2} w^{\varkappa_3 2}_{\pi_3 q_2}(ds)\right\}$$

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(dd), w^{\varkappa_2^2}_{\pi_2 q_2}(sd)] = \sum_{\varkappa_3 \pi_3} A(\pi_1, \varkappa_2\pi_2, 2q_2, \varkappa_3\pi_3) \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{(-1)^{1+\varkappa_3} w^{\varkappa_3^2}_{\pi_3 q_2}(sd)\right\}$$

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(ss), w^{\varkappa_2^2}_{\pi_2 q_2}(ds)] = \sum A(\text{----------}) \; 1 \times \left\{(-1)^{1+\varkappa_3} w^{\varkappa_3^2}_{\pi_3 q_2}(ds)\right\}$$

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(ss), w^{\varkappa_2^2}_{\pi_2 q_2}(sd)] = \sum A(\text{----------}) \; 1 \times \left\{(-1)^{1+\varkappa_2} w^{\varkappa_3^2}_{\pi_3 q_2}(sd)\right\}$$

Si $\varkappa_2=0$, $\varkappa_3=1$ on a $[w^{10}_{\pi_1 0}(dd) + \frac{1}{\sqrt{5}} w^{10}_{\pi_1 0}(ss), w^{02}_{0q_2}(ds)] = 0$

$$[w^{10}_{\pi_1 0}(dd) + \frac{1}{\sqrt{5}} w^{10}_{\pi_1 0}(ss), w^{02}_{0q_2}(sd)] = 0$$

Si $\varkappa_2=1$, $\varkappa_3=0$ ou 1 et $[w^{10}_{\pi_1 0}(dd) + \frac{1}{\sqrt{5}} w^{10}_{\pi_1 0}(ss), w^{12}_{\pi_2 q_2}(sd)] = 0$

$$[\text{----------}(ds)] = 0 \quad .$$

Donc la combinaison normalisée $\frac{1}{\sqrt{6}} \left\{\sqrt{5}\, w^{10}(dd) + w^{10}(ss)\right\}$ commute avec tous les opérateurs de rang $\neq 0$ pour l'orbite. Elle forme un sous-groupe invariant et on pourrait montrer qu'il s'agit du groupe SU_2 .

b) $\underline{SU_6}$.

On examine le même problème avec les opérateurs de SU_{12} de rang 0 par rapport au spin :

$$w^{0k}_{0q} \; k\neq 0 \quad \text{et} \quad \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{w^{00}_{00}(dd) - \sqrt{5}\, w^{00}_{00}(ss)\right\} \quad .$$

On change d'opérateurs et on utilise les $V^k = \sqrt{2} w^{0k}$

$$\langle \ell \| V^k(\ell_a \ell_b) \| \ell' \rangle = \sqrt{[k]}\; \delta(\ell \ell_a) \delta(\ell_b \ell') \quad . \qquad (4)$$

En faisant $\varkappa_1=\varkappa_2=q_1=q_2=0$ dans la formule (3) et en tenant compte de (4) on obtient

$$[V^{k_1}_{q_1}(ab),\ V^{k_2}_{q_2}(cd)] = \sum_{k_3 q_3} (-1)^{k_3+q_3}([k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \left[\delta(bc)(-1)^{\ell_a+\ell_d+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_d & \ell_a & \ell_b \end{Bmatrix} V^{k_3}_{q_3}(ad) \right.$$

$$\left. - \delta(ad)(-1)^{\ell_b+\ell_c+k_3} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_c & \ell_b & \ell_a \end{Bmatrix} V^{k_3}_{q_3}(cb) \right] \qquad (5)$$

Cette expression donne dans le cas $\ell_a\ell_b\ell_c\ell_d = d$

$$[V^{k_1}_{q_1}(dd),\ V^{k_2}_{q_2}(dd)] = \sum_{k_3 q_3} (-1)^{q_3}([k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \qquad (5')$$

$$\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ 2 & 2 & 2 \end{Bmatrix} \left\{ (-1)^{k_1+k_2+k_3} - 1 \right\} V^{k_3}_{q_3}(dd).$$

Les $V^k_q(dd)$ se transforment les uns dans les autres et le commutateur est non nul si $k_1+k_2+k_3$ impair.

Les opérateurs $V^k_q(ds)$ et $V^k_q(sd)$ donnent :

$$[V^2_{q_1}(ds),\ V^2_{q_2}(ds)] = 0 \qquad (6)$$

$$[V^2_{q_1}(sd),\ V^2_{q_2}(sd)] = 0 \qquad (7)$$

$$[V^2_{q_1}(ds),\ V^2_{q_2}(sd)] = (-1)^{q_1}\delta(q_2-q_1)\{V^0_0(dd) - \sqrt{5}\ V^0_0(ss)\}\frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$+ \sum_{k_3\neq 0} (-1)^{q_3}\sqrt{[k_3]} \begin{pmatrix} 2 & 2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} V^{k_3}_{q_3}(dd) \qquad (8)$$

$$[V^2_{q_1}(sd),\ V^2_{q_2}(ds)] = (-1)^{q_1+1}\ \delta(q_2-q_1)\{V^0_0(dd) - \sqrt{5}\ V^0_0(ss)\}\ \frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$+ \sum_{k_3\neq 0} (-1)^{k_3+q_3+1}\sqrt{[k_3]}\ \begin{pmatrix} 2 & 2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} V^{k_3}_{q_3}(dd) \qquad (9)$$

$$[V^{k_1}_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(ds)] = (-1)^{q_3}\sqrt{[k_1]}\ \begin{pmatrix} k_1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} V^2_{q_3}(ds) \qquad (10)$$

$$[V^{k_1}_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(sd)] = (-1)^{q_3}\ (-1)^{k_1+1}\sqrt{[k_1]}\ \begin{pmatrix} k_1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} V^2_{q_3}(sd)\ . \qquad (11)$$

Les relations de commutation caractéristique de U_n ou SU_n sont

$$\boxed{[X_{ik}, X_{\ell m}] = \delta_{im}\ X_{\ell k} - \delta_{\ell k}\ X_{im}} \qquad (12)$$

Posons $X_{00} = \{\sqrt{5}\ V^0_0(ss) - V^0_0(dd)\}$ et cherchons quels opérateurs pourraient jouer le rôle de X_{0m_1} et $X_{m_2 0}$. Ces derniers vérifient

$$[X_{m_2 0}, X_{0m_1}] = \delta(m_2 m_1)\ X_{00} - X_{m_2 m_1}\ .$$

En comparant aux relations (8) et (9) on trouve qu'on peut essayer d'identifier

$$\begin{cases} X_{m_2 0} \equiv V^2_{q_2}(sd) \\ X_{0-m_1} \equiv V^2_{q_1}(ds) \end{cases}$$

et $$X_{m_2 m_1} = \sum_{k_3\neq 0} (-1)^{q_3}\sqrt{[k_3]}\ \begin{pmatrix} 2 & 2 & k_3 \\ -q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix} V^{k_3}_{q_3}(dd)\ .$$

Avec ce choix les relations (6)(7)(8)(9) sont bien du type cherché.

Il resterait à montrer que c'est vrai dans les cas

$$[X_{m_2 m_1}, X_{m'_2 m'_1}] \quad \text{et} \quad \begin{matrix}[X_{m_2 m_1}, X_{0m_1}] \\ [\ \ \ , X_{m_2 0}]\end{matrix}\ .$$

On trouve, tous calculs faits, que les relations (5') et (10)(11) sont du type cherché. En fait on montre que les opérateurs $V^1(dd)$, $\varepsilon\ V^2(dd)$, $V^3(dd)$, $\varepsilon\ V^4(dd)$, $\varepsilon' V^2(ds)$, $\varepsilon' V^2(sd)$ et $\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\sqrt{5}\ V^0(ss) - V^0(dd)\right]$ forment les opérateurs infinitésimaux de SU_6 où ε et ε' peuvent prendre les valeurs ± 1 . Dans ce qui suit nous prendrons $\varepsilon = \varepsilon' = 1$, choix qui fixe les phases respectives des états monoélectroniques.

3°) Réduction $SU_6 \supset SU_3 \supset R_3$.

Le groupe SU_3 a 8 générateurs qui comprendront les 3 générateurs de R_3 . Montrons que ce sont $V^1(dd)$ et

$$V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}}\left[\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2\ V^2(ds) + V^2(sd)\right].$$

a) Sous-groupe R_3 .

La relation (5') donne

$$\left[V^1_{q_1}(dd),\ V^1_{q_2}(dd)\right] = \sum_q (-1)^{q+1} \sqrt{\frac{3}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q(dd) \quad .$$

Les $V^1_q(dd)$ forment un sous-groupe à eux seuls. On montre que c'est le groupe R_3 . On a en effet :

$$\left[V^1_1(dd),\ V^1_0(dd)\right] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_1(dd)$$

$$\left[V^1_{-1}(dd),\ V^1_0(dd)\right] = \frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_{-1}(dd)$$

$$\left[V^1_1(dd),\ V^1_{-1}(dd)\right] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_0(dd) \quad .$$

Relations qui sont bien celles vérifiées par L avec

$$\boxed{V^1(dd) = \frac{-1}{\sqrt{10}}\ L} \quad .$$

b) Sous-groupe SU_3 .

Pour montrer que $V^1(dd)$ et V^{+2} sont les opérateurs infinitésimaux de SU_3 écrivons en détail l'ensemble des relations de commutation : Relations de commutation des opérateurs V^k :

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^1_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q+1}\sqrt{\frac{3}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q(dd)$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q}\sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^2_q(dd)$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^0_0(dd)] = 0$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^3_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q+1}\sqrt{\frac{42}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 3 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^3_q(dd)$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^4_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q}\ 6\sqrt{\tfrac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^4_q(dd)$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2(sd)}(ds)] = \sum_q (-1)^{q}\sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^2_{q(sd)}(ds)$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^0_0(ss)] = 0$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q}\sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q(dd) + \sum_q (-1)^{q+1}\ 8\sqrt{\frac{1}{7}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^3_q(dd)$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^0_0(dd)] = 0$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^3_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q+1}\ 8\sqrt{\frac{1}{7}} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^2_q(dd) + \sum_q (-1)^{q}\ 3\sqrt{\frac{10}{7}} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^4_q(dd)$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^4_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^q\, 3\sqrt{\frac{10}{7}} \begin{pmatrix} 2 & 4 & 3 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^3_q(dd)$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(ds)] = \sum_q (-1)^q \sqrt{5} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^2_q(ds)$$

$$[\quad ,\quad (sd)] = \sum_q (-1)^{q+1} \qquad\qquad V^2_q(sd)$$

$$[V^2_{q_1}(dd),\ V^0_0(ss)] = 0$$

$$[V^2_{q_1}(ds),\ V^0_0(dd)] = \pm (-1)^{q_1+1} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q_1 & 0 & -q_1 \end{pmatrix} V^2_{q(sd)}(ds)$$

$$[V^2_{q_1(sd)}(ds),\ V^3_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^q \sqrt{7} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^{2(ds)}_{q(sd)}$$

$$[V^2_{q_1(sd)}(ds),\ V^4_{q_2}(dd)] = \pm \sum_q (-1)^{q+1}\, 3 \begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^2_{q(sd)}(ds)$$

$$[V^2_{q_1(sd)}(ds),\ V^2_{q_2(sd)}(ds)] = 0$$

$$[V^2_{q_1(sd)}(ds),\ V^2_{q_2}(sd)] = \pm \sum_{kq} (-1)^{k+q}\, 5\, \sqrt{[k]} \begin{pmatrix} 2 & 2 & k \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & k \\ 2 & 2 & 0 \end{Bmatrix} V^2_q(dd)$$

$$\mp \sqrt{5} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ q_1 & q_2 & 0 \end{pmatrix} V^0_0(ss)$$

$$[V^2_{q_1(sd)}(ds),\ V^0_0(ss)] = \pm \sum_q (-1)^q \sqrt{5} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^{2(ds)}_{q(sd)}$$

On a :

$$V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}} [\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2V^2(ds) + 2V^2(sd)] = \alpha V^2(dd) + \beta V^2(ds) + \beta V^2(sd)$$

$$= \alpha V^2 a - \beta V^2 b - \beta V^2 c \ .$$

Calculons $[V^{+2},\ V^{+2}]$

$$[V^{+2}_{q_1},\ V^{+2}_{q_2}] = \alpha^2[V^2_{q_1}a,\ V^2_{q_2}a] + \beta^2[V^2_{q_1}b, V^2_{q_2}b] + \beta^2[V^2_{q_1}c,\ V^2_{q_2}c] + \alpha\beta[V^2_{q_1}a,\ V^2_{q_2}b]$$

$$+ \alpha\beta[V^2_{q_1}a,\ V^2_{q_2}c] + \beta^2[V^2_{q_1}b,\ V^2_{q_2}c] + \alpha\beta[V^2_{q_1}b,\ V^2_{q_2}a]$$

$$+ \alpha\beta[V^2_{q_1}c,\ V^2_{q_2}a] + \beta^2[V^2_{q_1}c,\ V^2_{q_2}b]$$

Or $[V^2_{q_1}(dd),\ V^2_{q_2}(ds)] + [V^2_{q_1}(ds),\ V^2_{q_2}(dd)] = 0$

$\beta^2\{[V^2_{q_1}(ds),\ V^2_{q_2}(sd)] - [V^2_{q_2}(ds),\ V^2_{q_1}(sd)]\} = 0$ si k pair

Il reste

si k=1 $\sum_q (-1)^q\ 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q(dd)$

k=3 $\sum_q (-1)^q\ 2\sqrt{7} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^3_q(dd)$

$$[V^{+2}_{q_1},\ V^{+2}_{q_2}] = \frac{7}{15}\sum_q (-1)^q\ 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ - & - & - \end{pmatrix} V^1_q(dd) + \frac{7}{15}\sum_q (-1)^{q+1}\ \frac{8}{\sqrt{7}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ - & - & - \end{pmatrix}$$

$$V^3_q(dd) + \frac{4}{15}\sum_q (-1)^q\ 2\sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ - & - & - \end{pmatrix} V^1_q(dd)$$

$$- \frac{4}{15}\sum_q (-1)^{q+1}\ 2\sqrt{7} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ - & - & - \end{pmatrix} V^3_q(dd)$$

Soit finalement

$$\boxed{[V^{+2}_{q_1},\ V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^q\ \sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q(dd)} \qquad \text{qui avec}$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^q\ \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^{+2}_q$$

$$[V^1_{q_1}(dd),\ V^{+2}_{q_2}(dd)] = \sum_q (-1)^{q+1} \sqrt{\frac{3}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q$$

sont les relations à étudier,

et on pourrait montrer qu'on peut mettre ces relations sous la forme caractéristique de U_n donnée formule (12).

Nous préférons ici faire apparaître la forme standard H_i, E_α de façon à calculer le tenseur métrique et l'opérateur de Casimir.

II) Etude de $SU_3(d+s) \supset R_3$.

1°) Tenseur métrique et opérateur de Casimir de $SU_3(d+s)$.

a) Détermination des constantes de structure c_{ij}^{τ} .

On a vu au chapitre I que, si les commutateurs des opérateurs infinitésimaux d'un groupe semi-simple s'écrivent $[X_\rho X_\sigma] = c_{\rho\sigma}^{\tau} X_\tau$, le tenseur métrique s'écrit $g_{\rho\sigma} = c_{\rho\lambda}^{\mu} c_{\sigma\mu}^{\lambda}$ et l'opérateur de Casimir $G = g^{\rho\sigma} X_\rho X_\sigma$.

Si, de plus, on a mis les X sous forme standard, alors G s'écrit : $G = g^{ik} H_i H_k + \sum_\alpha g^{\alpha-\alpha} E_\alpha E_{-\alpha}$ avec les H_i et les E_α vérifiant :

$$\begin{cases} [H_i, H_j] = 0 & c_{ij}^{\tau} = 0 \\ [H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha & c_{i\alpha}^{\tau} = \alpha_i \delta_\alpha^{\tau} \qquad \alpha = \lambda^i \alpha_i \\ [E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta} = C_{\alpha\beta}^{\alpha+\beta} E_{\alpha+\beta} & \text{si } \alpha+\beta \text{ est une racine} \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = c_{\alpha-\alpha}^{i} H_i = \alpha^i H_i & . \end{cases}$$

Le tenseur métrique a donc la forme

$$g_{\sigma\rho} = \begin{array}{|c|c|}\hline g_{ik} & 0 \\ \hline 0 & \begin{array}{ccc} 0 & & g_{\alpha-\alpha} \\ & 0 & \\ g_{-\alpha\alpha} & & 0 \end{array} \\ \hline \end{array}$$

et on peut normaliser

$$g_{\alpha-\alpha} = g_{\beta-\beta} = 1$$

Les générateurs de $SU_3(d+s)$ sont

$$\left|\begin{array}{l} V^1(dd) \\ V^{+2} = \frac{1}{\sqrt{15}}\left[\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2(V^2(ds)+V^2(sd))\right] . \end{array}\right.$$

Pour voir s'ils sont sous forme standard écrivons leurs relations de commutation. On a vu que :

$$[V^1_{q_1},\ V^1_{q_2}] = \sum_q (-1)^{q+1}\sqrt{\frac{3}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q$$

$$[V^1_{q_1},\ V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^{q}\sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^{+2}_q$$

$$[V^{+2}_{q_1},\ V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^{q}\sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} V^1_q$$

Ou plus complètement

$$[V^1_0,\ V^1_{\pm1}] = \pm\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_{\pm1} \qquad [V^{+2}_0,\ V^1_{\mp1}] = \mp\sqrt{\frac{3}{10}}\ V^{+2}_{\mp1} \qquad [V^1_1,\ V^1_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_0$$

$$[V^1_0,\ V^{+2}_{\mp2}] = \mp\sqrt{\frac{2}{5}}\ V^{+2}_{\mp2} \qquad [V^{+2}_0,\ V^{+2}_{\mp2}] = 0 \qquad [V^1_0,\ V^1_0] = 0$$

$$[V^1_0,\ V^{+2}_{\mp1}] = \mp\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^{+2}_{\mp1} \qquad [V^{+2}_0,\ V^{+2}_{\mp1}] = \mp\sqrt{\frac{3}{10}}\ V^1_{\mp1} \qquad [V^1_0,\ V^{+2}_0] = 0$$

$$[V^{+2}_2,\ V^1_0] = -\sqrt{\frac{2}{5}}\ V^{+2}_2 \qquad [V^1_1,\ V^{+2}_{-1}] = -\sqrt{\frac{3}{10}}\ V^{+2}_0 \qquad [V^{+2}_0,\ V^{+2}_0] = 0$$

$$[V^{+2}_2,\ V^1_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{5}}\ V^{+2}_1 \qquad [V^{+2}_1,\ V^1_{-1}] = -\sqrt{\frac{3}{10}}\ V^{+2}_0 \qquad [V^1_1,\ V^1_1] = 0$$

$$[V^{+2}_1,\ V^{+2}_{-1}] = -\frac{1}{\sqrt{10}}\ V^1_0 \qquad [V^1_1,\ V^{+2}_1] = -\sqrt{\frac{1}{5}}\ V^{+2}_2 \qquad [V^{+2}_1,\ V^{+2}_1] = 0$$

$$[V^{+2}_2,\ V^{+2}_{-2}] = \sqrt{\frac{2}{5}}\ V^1_0 \qquad [V^{+2}_{-1},\ V^1_{-1}] = -\sqrt{\frac{1}{5}}\ V^{+2}_{-2}$$

On obtient $[H_i,H_j] = 0$ pour V_0^1 et V_0^{+2} soit $\begin{cases} H_1 = V_0^1 \\ H_2 = V_0^{+2} \end{cases}$

Pour obtenir la forme $[H_i,E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha$ on voit qu'on doit prendre, à une normalisation près

$(-\alpha)$ $E_{-1} = V_{-1}^1 + V_{-1}^{+2}$ $\qquad$ $E'_{-1} = V_{-1}^1 - V_{-1}^{+2}$ $\quad (-\beta)$

(α) $E_1 = V_1^1 + V_1^2$ $\qquad$ $E'_1 = V_1^1 - V_1^{+2}$ $\quad (\beta)$

$(-\gamma)$ $E_{-2} = V_{-2}^{+2}$ $\qquad$ $H_1 = V_0^1$

(γ) $E_2 = V_2^{+2}$ $\qquad$ $H_2 = V_0^{+2}$

On a alors : $[H_1,E_{\pm1}] = \pm\frac{1}{\sqrt{10}} E_{\pm1}$ $\qquad$ $[H_2,E_{\pm1}] = \pm\sqrt{\frac{3}{10}} E_{\pm1}$

$[H_1,E'_{\pm1}] = \pm\frac{1}{\sqrt{10}} E'_{\pm1}$ $\qquad$ $[H_2,E'_{\pm1}] = \pm\sqrt{\frac{3}{10}} E_{\pm1}$

$[H_1,E_{\pm2}] = \pm\sqrt{\frac{2}{5}} E_{\pm2}$ $\qquad$ $[H_2,E_{\pm2}] = 0$

$[E_1,E_{-1}] = -\sqrt{\frac{2}{5}} V_0^1 - \sqrt{\frac{6}{5}} V_0^2 = \alpha^i H_i$

$[E'_1,E'_{-1}] = -\sqrt{\frac{2}{5}} V_0^1 + \sqrt{\frac{6}{5}} V_0^2$

$[E_2,E_{-2}] = \sqrt{\frac{2}{5}} V_0^1$

On en tire : $\begin{cases} C^1_{\alpha-\alpha} = -\sqrt{\frac{2}{5}} & C^2_{\alpha-\alpha} = -\sqrt{\frac{6}{5}} \\ C^1_{\beta-\beta} = -\sqrt{\frac{2}{5}} & C^2_{\beta-\beta} = \sqrt{\frac{6}{5}} \\ C^1_{\gamma-\gamma} = \sqrt{\frac{2}{5}} & C^2_{\gamma-\gamma} = 0 \end{cases}$

b) Tenseur métrique .

$$g_{\rho\sigma} = c^{\tau}_{\rho\mu}\, c^{\mu}_{\sigma\tau} \qquad g_{ik} = c^{\alpha}_{i\alpha}\, c^{\alpha}_{k\alpha} = \sum_{\alpha} \alpha_i \alpha_k$$

On a donc $g_{11} = \alpha_1\alpha_1 + \beta_1\beta_1 + \ldots + \varepsilon_1\varepsilon_1 = 4 \times \frac{1}{10} + 2 \times \frac{2}{5} = \frac{6}{5}$

$$g_{22} = \alpha_2\alpha_2 + \ldots\ldots\ldots + \varepsilon_2\varepsilon_2 = 4 \times \frac{3}{10} = \frac{6}{5}$$

$$g_{21} = g_{12} = \alpha_1\alpha_2 + \ldots\ldots\ldots + \varepsilon_1\varepsilon_2 = 0$$

Soit

$$g_{\sigma\rho} = \begin{array}{|cc|c|} \hline \frac{6}{5} & 0 & \\ 0 & \frac{6}{5} & \\ \hline & & \begin{array}{cc} 0 & g_{\alpha-\alpha} \\ g_{-\alpha\alpha} & 0 \end{array} \\ \hline \end{array}$$

Pour déterminer les $g_{\alpha-\alpha}$... écrivons les relations de commutation des $E_\alpha\ E_\beta\ E_\gamma$ entre eux. On a :

$$[E_1, E'_1] = \frac{2}{\sqrt{5}} E_2 \quad \equiv \quad [E_\alpha, E_\beta] = c^{\gamma}_{\alpha\beta} E_\gamma \quad \Rightarrow c^{\gamma}_{\alpha\beta} = \frac{2}{\sqrt{5}} \quad c^{x}_{\alpha-\beta} = 0$$

$$[E_1, E_{-2}] = \frac{1}{\sqrt{5}} E'_{-1} \quad \equiv \quad [E_\alpha, E_{-\gamma}] = c^{-\beta}_{\alpha-\gamma} E_{-\beta} \quad \Rightarrow c^{-\beta}_{\alpha-\gamma} = \frac{1}{\sqrt{5}} \quad c^{x}_{\alpha\gamma} = 0$$

$$[E'_1, E_{-2}] = \frac{1}{\sqrt{5}} E_{-1} \quad \equiv \quad [E_\beta, E_{-\gamma}] = c^{-\alpha}_{\beta-\gamma} E_{-\alpha} \quad \Rightarrow c^{-\alpha}_{\beta-\gamma} = \frac{1}{\sqrt{5}} \quad c^{x}_{\beta\gamma} = 0$$

$$g_{\alpha-\alpha} = c^{\tau}_{\alpha\mu}\, c^{\mu}_{-\alpha\tau}$$

Les constantes non nulles sont $c^{\gamma}_{\alpha\beta}$ $c^{\beta}_{-\alpha\gamma}$ $c^{-\gamma}_{-\alpha-\beta}$ $c^{-\beta}_{\alpha-\gamma}$ $c^{\alpha}_{\alpha_i}$ et $c^{i}_{\alpha-\alpha}$.

On obtient $g_{\alpha-\alpha} = c^{\gamma}_{\alpha\beta} c^{\beta}_{-\alpha\gamma} + c^{-\beta}_{\alpha-\gamma} c^{-\gamma}_{-\alpha-\beta} + c^{\alpha}_{\alpha i} c^{i}_{\alpha-\alpha} + c^{i}_{\alpha-\alpha} c^{-\alpha}_{-\alpha i}$

$$= -\frac{2}{\sqrt{5}} \times \frac{1}{\sqrt{5}} - \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{2}{\sqrt{5}} + \left(-\frac{1}{\sqrt{10}} \sqrt{\frac{2}{5}} - \sqrt{\frac{3}{10}} \sqrt{\frac{6}{5}}\right) 2$$

$$g_{\alpha-\alpha} = -\frac{12}{5} \quad .$$

De même $g_{\beta-\beta} = c^{\gamma}_{\beta\alpha} c^{\alpha}_{-\beta\gamma} + c^{-\alpha}_{\beta-\gamma} c^{-\gamma}_{-\beta-\alpha} + c^{\beta}_{\beta i} c^{i}_{\beta-\beta} + c^{i}_{\beta-\beta} c^{-\beta}_{-\beta i}$

$$g_{\beta-\beta} = \frac{12}{5}$$

et $$g_{\gamma-\gamma} = c^{\beta}_{\gamma-\alpha} c^{-\alpha}_{-\gamma\beta} + c^{\alpha}_{\gamma-\beta} c^{-\beta}_{-\gamma\alpha} + c^{\gamma}_{\gamma i} c^{i}_{\gamma-\gamma} + c^{i}_{\gamma-\gamma} c^{-\gamma}_{-\gamma i} = \frac{6}{5} .$$

Dans cette base le tenseur métrique a donc la forme

$$g_{\mu\rho} = \left|\begin{array}{cc|cccc} \frac{6}{5} & 0 & & & & \\ & \frac{6}{5} & & & & \\ 0 & & & & & \\ & & 0 & -\frac{12}{5} & 0 & 0 \\ & & -\frac{12}{5} & 0 & -\frac{12}{5} & 0 \\ & & 0 & -\frac{12}{5} & 0 & \frac{+6}{5} \\ & & 0 & 0 & \frac{+6}{5} & 0 \end{array}\right| \quad \text{et} \quad g^{\mu\rho} = \left|\begin{array}{cc|cccc} \frac{5}{6} & 0 & & & & \\ & \frac{5}{6} & & & & \\ 0 & & & & & \\ & & 0 & -\frac{5}{12} & 0 & 0 \\ & & -\frac{5}{12} & 0 & -\frac{5}{12} & 0 \\ & & 0 & -\frac{5}{12} & 0 & \frac{5}{6} \\ & & 0 & 0 & \frac{5}{6} & 0 \end{array}\right|$$

c) Opérateur de Casimir .

$$G = g^{ik} H_i H_k + \sum_{\alpha} g^{\alpha-\alpha} E_{\alpha} E_{-\alpha}$$

$$G = \frac{5}{6} (V^1_0 V^1_0 + V^{+2}_0 V^{-2}_0) - \frac{5}{12} [(V^1_1 + V^{-2}_1)(V^1_{-1} + V^{+2}_{-1}) + (V^1_{-1} + V^{+2}_{-1})(V^1_1 + V^{-2}_1)$$

$$+ \frac{5}{6} (V^{+2}_2 V^{+2}_{-2} + V^{+2}_{-2} V^{+2}_2) + (V^1_1 - V^{+2}_1)(V^1_{-1} - V^{+2}_{-1}) + (V^1_{-1} - V^{+2}_{-1})(V^1_1 - V^{+2}_1)]$$

$$= \frac{5}{6} [\sum_q (-1)^q V^1_q V^1_{-q} + \sum_q (-1)^q V^{+2}_q V^{+2}_{-q}]$$

Soit : $$\boxed{G = \frac{5}{6} [V^1 . V^1 + V^{-2} . V^{+2}]}$$

opérateur dont nous allons donner les valeurs propres pour une représentation u de SU_3 .

2°) Notation d'Elliott pour les représentations de SU_3 - Valeurs propres de l'opérateur de Casimir.

Les représentations de SU_3 sont caractérisées par leur poids le plus haut $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\}$ lorsqu'on utilise, dans l'espace des poids, une base e_1,e_2,e_3 à trois dimensions. Or la figure des racines de SU_3 est plane et on peut donc restreindre la base. Dans cette nouvelle base le poids $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\}$ s'écrit $(\lambda_1-\lambda_2,\lambda_2-\lambda_3) = (\sigma_1\sigma_2)$ et on peut montrer que ces 2 notations sont complètement équivalentes. Un poids de SU_3 vérifie $\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=0$, soit $\lambda_2 = -\lambda_1-\lambda_3$. D'autre part $\sigma_1 = \lambda_1-\lambda_2$, $\sigma_2 = \lambda_2-\lambda_3$. On en déduit les relations $\lambda_1 = \frac{2}{3}\sigma_1+\frac{1}{3}\sigma_2$, $\lambda_3 = -\frac{1}{3}\sigma_1-\frac{2}{3}\sigma_2$ et $\lambda_2 = -\frac{1}{3}\sigma_1+\frac{1}{3}\sigma_2$ correspondant au changement de base $\begin{vmatrix} e'_1 = -\frac{2}{3}e_1-\frac{1}{3}e_2-\frac{1}{3}e_3 \\ e'_2 = \frac{1}{3}e_1+\frac{1}{3}e_2-\frac{2}{3}e_3 \end{vmatrix}$.

Pour trouver la valeur propre de G_{SU_3} correspondant à une représentation $\{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\}$ on va utiliser les formes standard .

On a $G = g^{ik} H_i H_k + \sum_{\alpha} g^{\alpha-\alpha} E_\alpha E_{-\alpha}$.

Avec la base e_1,e_2,e_3 les racines α sont de type e_i-e_j soit e_1-e_2 , e_2-e_3 , e_1-e_3 , e_2-e_1 , e_3-e_2 , e_3-e_1 , et les racines positives α^+ telles que $E_\alpha+u=0$ sont e_1-e_2 , e_2-e_3 , e_1-e_3 .

Les tenseurs métriques ne sont bien sûr pas les mêmes dans les bases. On trouve respectivement pour g_{ij}

base e_1,e_2,e_3 $\quad g^{(1)}_{ij}$ $\begin{vmatrix} 4 & -2 & -2 \\ -2 & 4 & -2 \\ -2 & -2 & 4 \end{vmatrix}$ $\qquad$ base e'_1 , e'_2 $\quad g^{(2)}_{ij}$ $\begin{vmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 6 \end{vmatrix}$.

Si on appelle L le poids le plus haut d'une représentation irréductible et $\bar{u}$ le vecteur propre correspondant, on montre qu'on peut écrire :

$$G\,\bar{u} = \left[(LL) + \sum_{\alpha^+} (\alpha L)\right]\bar{u} = g^{ii}\left[L_i L_i + \sum_{\alpha^+} \alpha_i L_i\right]\bar{u}$$

ou encore $G\,\bar{u} = (K^2 - R^2)\bar{u} = g^{ii}(K_i K_i - R_i R_i)\,\bar{u}$ avec

$$K = L + R \quad \text{et} \quad R = \tfrac{1}{2}\sum_{\alpha^+} \alpha \quad .$$

On a ici $R = \frac{1}{2}\left[e_1 - e_2 + e_2 - e_3 + e_1 - e_3\right] = e_1 - e_3$

$$K = L + R = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2 + \lambda_3 e_3 + e_1 - e_3 = (\lambda_1 + 1)e_1 + \lambda_2 e_2 + (\lambda_3 - 1)e_3$$

Soit $G(u) = g^{ii}_{(1)}\left[(\lambda_1+1)^2 + \lambda_2^2 + (\lambda_3 - 1)^2 - 2\right] = g^{ii}_{(1)}\left[\lambda_1(\lambda_1+2) + \lambda_2^2 + \lambda_3(\lambda_3-2)\right]$

En repassant à la base d'Elliott, c'est-à-dire en remplaçant $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ par leur valeur en fonction de σ_1, σ_2 et en utilisant la 2ème forme du tenseur métrique on a

$$\boxed{G(\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{9}\left[\sigma_1^2 - \sigma_2^2 + \sigma_1\sigma_2 + 3\sigma_1 + 3\sigma_2\right]} \quad .$$

3°) Classification des générateurs de SU_3 et de l'ensemble des opérateurs monoélectroniques de $(d+s)^N$.

a) Classification des générateurs u_n .

On a vu au Chapitre I qu'une représentation irréductible est caractérisée par son poids le plus haut où les poids $(m_1 \ldots m_\ell)$ sont définis par les équations :

$$H_i\,u = m_i\,u \qquad i = 1 \ldots \ell \quad .$$

Pour trouver suivant quelles représentations de U_n les générateurs $X_{k\ell}$ de U_n se transforment, il faut donc étudier les relations $[H_i, X_{k\ell}] = m_i X_{k\ell}$.

Prenons le cas de U_3 : on a les relations

$[X_{11}, X_{11}] = 0$	$[X_{22}, X_{11}] = 0$	$[X_{33}, X_{11}] = 0$
$[\ \ , X_{12}] = X_{12}$	$[\ \ , X_{12}] = -X_{12}$	$[\ \ , X_{12}] = 0$
$[\ \ , X_{13}] = X_{13}$	$[\ \ , X_{13}] = 0$	$[\ \ , X_{13}] = -X_{13}$
$[\ \ , X_{21}] = -X_{21}$	$[\ \ , X_{21}] = X_{21}$	$[\ \ , X_{21}] = 0$
$[\ \ , X_{22}] = 0$	$[\ \ , X_{22}] = 0$	$[\ \ , X_{22}] = 0$
$[\ \ , X_{23}] = 0$	$[\ \ , X_{23}] = X_{23}$	$[\ \ , X_{23}] = -X_{23}$
$[\ \ , X_{31}] = -X_{31}$	$[\ \ , X_{31}] = 0$	$[\ \ , X_{31}] = X_{31}$
$[\ \ , X_{32}] = 0$	$[\ \ , X_{32}] = -X_{32}$	$[\ \ , X_{32}] = X_{32}$
$[\ \ , X_{33}] = 0$	$[\ \ , X_{33}] = 0$	$[\ \ , X_{33}] = 0$

Les différents poids obtenus sont donc :

$[X_{11}, X_{11}]$ (22, 33) => (000)

$[X_{11}, X_{12}]$ (22, 33) => (1-10)

$[X_{11}, X_{13}]$ (22, 33) => (10-1)

$[X_{11}, X_{21}]$ (22, 33) => (-110)

$[X_{11}, X_{22}]$ (22, 33) => (000)

$[X_{11}, X_{23}]$ (22, 33) => (01-1)

$[X_{11}, X_{31}]$ (22, 33) => (-101)

$[X_{11}, X_{32}]$ (22, 33) => (0-11)

$[X_{11}, X_{33}]$ (22, 33) => (000)

Dimension totale = $9 = n^2$.

D'après les critères donnés au Chapitre I, le poids le plus haut est ici $(10\text{-}1) \equiv \{210\}$ de U_3 . La dimension de $\{210\}$ est 8 soit les 6 poids du type $(10\text{-}1)$ et 2 du type (000) .
Il reste un poids (000) correspondant donc à une représentation $\{0\}$.
Finalement les générateurs se transforment comme $\{210\}+\{000\}$.

D'une façon plus générale, on montre que pour un groupe U_n (n opérateurs H_i , n^2 poids) les générateurs se transforment comme $\{21^{n-2}0\}+\{0\}$ de U_n et les générateurs de SU_n comme la représentation $\{21^{n-2}\}$ de SU_n .

Les générateurs V^1 et V^{n-1} de SU_3 se transforment donc comme la représentation $\{21\}$ de SU_3 .

b) Classification de l'ensemble des opérateurs monoélectroniques de $(d\text{-}s)^N$.

L'ensemble des $w^{\varkappa k}_{\pi q}(\ell\ell')$ forment les générateurs de SU_{12} et se transforment comme $\{21^{10}\}$ de SU_{12} . On a vu qu'ils se mettent sous la forme d'un produit direct $SU_2 \times SU_6$ où les V^k forment les générateurs de SU_6 et se transforment donc comme $\{21^4\}$ de SU_6 . On trouve facilement que dans la classification $SU_{12} \to SU_2 \times SU_6$ la représentation $\{21^{10}\}$ de SU_{12} se réduit suivant

$$\{21^{10}\} \to {}^1\{21^4\} + {}^3\{21^4\} + {}^3\{0\} \quad .$$

Les générateurs de SU_3 se transforment comme $\{21\}$ de SU_3 . Ainsi

dans la réduction $SU_6 \supset SU_3$ la représentation $\{21^4\}$ de SU_6 contiendra au moins $\{21\}$ de SU_3. En fait, on trouve que

$$\underset{35}{\{21^4\}} \rightarrow \underset{8}{\{21\}} + \underset{27}{\{42\}} \quad .$$

Dans la réduction $SU_3 \supset R_3$ on a

$\{21\}$ 1, 2

$\{42\}$ 0, 2, 2', 3, 4 .

D'après ce qui a été vu à l'aide des relations de commutation on a

$$\{42\}\ 0 \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} \{V^0(dd) - \sqrt{5}\ V^0(ss)\}$$

$$\{21\}\ 1 \equiv V^1(dd)$$

$$\{21\}\ 2 \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} \{\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2(V^2(ds) + V^2(sd))\}$$

On a évidemment

$$\{42\}\ 3 \equiv V^3(dd)$$

$$\{42\}\ 4 \equiv V^4(dd) \quad .$$

Il ne reste à trouver que 2 combinaisons $\{42\}$ 2 et $\{42\}$ 2' de $V^2(dd)$, $V^2(ds)$, $V^2(sd)$

- Combinaison orthogonale à $\{21\}$ 2

$$\{42\}\ 2 \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} \{\sqrt{8}\ V^2(dd) - \sqrt{\frac{7}{2}}\ (V^2(ds)+V^2(sd))\}$$

- Combinaison orthogonale à $\{21\}$ 2 et $\{42\}$ 2'

$$\{42\}\ 2' \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \{V^2(ds) - V^2(sd)\}$$

En notation d'Elliott on a donc :

$$\left|\begin{array}{l} (11)1 \equiv V^1(dd) \equiv \frac{1}{\sqrt{10}}\ L \\ (11)2 \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} \{\sqrt{7}\ V^2(dd) + 2V^2(ds) + 2V^2(sd)\} \equiv V^{+2} \end{array}\right.$$

$$
\begin{cases}
(22)0 \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} \{V^0(dd) - \sqrt{5}\, V^0(ss)\} \\
(22)2 \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} \{\sqrt{8}\, V^2(dd) - \sqrt{\frac{7}{2}}\, V^2(ds) - \sqrt{\frac{7}{2}}\, V^2(sd)\} \\
(22)2' \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \{V^2(ds) - V^2(sd)\} \\
(22)3 \equiv V^3(dd) \\
(22)4 \equiv V^4(dd) \quad .
\end{cases}
$$

D'autre part, d'après ce qu'on a vu

$$(00)0 \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} [\sqrt{5}\, V^0(dd) + V^0(ss)] \quad .$$

En inversant ces relations on obtient

$$
\begin{cases}
V^0(ss) \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} [(00)0 - \sqrt{5}\, (22)0] \\
V^0(dd) \equiv \frac{1}{\sqrt{6}} [\sqrt{5}\, (00)0 + (22)0] \\
V^2(dd) \equiv \frac{1}{\sqrt{15}} [\sqrt{7}\, (11)2 + \sqrt{8}\, (22)2] \\
V^2(ds) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\sqrt{\frac{8}{15}}\, (11)2 - \sqrt{\frac{7}{15}}\, (22)2 + (22)2'] \\
V^2(sd) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\sqrt{\frac{8}{15}}\, (11)2 - \sqrt{\frac{7}{15}}\, (22)2 - (22)2'] \\
V^1(dd) \equiv (11)1 \\
V^3(dd) \equiv (22)3 \\
V^4(dd) \equiv (22)4 \quad .
\end{cases}
$$

4°) Calcul des éléments de matrice réduits des opérateurs monoélectroniques.

Le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire :

$$[V^k_q, \{\lambda_1\tau_1\}^{k_1}_{q_1}] = \sum_{\lambda_2\tau_2 k_2 q_2} (-1)^{k_2 - q_2} \begin{pmatrix} k & k_1 & k_2 \\ q & q_1 & -q_2 \end{pmatrix} \langle \lambda_1\tau_1 k_1 \| V^k \| \lambda_2\tau_2 k_2 \rangle \{\lambda_2\tau_2\}^{k_2}_{q_2} \qquad (1)$$

où la somme sur λ_2 disparaît si le V^k considéré est un générateur de SU_3 . D'autre part les relations de commutation s'écrivent dans le cas général

$$[V^{k_1}_{q_1}(\ell_a\ell_b),\ V^{k_2}_{q_2}(\ell_c\ell_d)] = \sum_{k_3 q_3} (-1)^{k_3+q_3}([k_1][k_2][k_3])^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ q_1 & q_2 & -q_3 \end{pmatrix}$$

$$\left\{\delta(\ell_b\ell_c)(-1)^{\ell_a+\ell_d+k_1+k_2} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_d & \ell_a & \ell_b \end{Bmatrix} V^{k_3}_{q_3}(\ell_a\ell_d)\right. \qquad (2)$$

$$\left. - \delta(\ell_a\ell_d)(-1)^{\ell_c+\ell_c+k_3} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k_3 \\ \ell_c & \ell_b & \ell_a \end{Bmatrix} V^{k_3}_{q_3}(\ell_c\ell_b)\right\}$$

L'ensemble des relations (1) et (2) est suffisant pour déterminer les éléments de matrice des $V^k_q(\ell\ell')$ pour les représentations (11) et (22).

Pour $V^1(dd) \equiv \frac{1}{\sqrt{10}}\,\bar{L}$ les éléments de matrice sont immédiats

$$= \frac{1}{\sqrt{10}}\sqrt{L(L+1)(2L+1)} \quad . \qquad (3)$$

D'autre part on peut utiliser les relations de commutation des opérateurs $(11)\,V^1$ et $(11)\,V^{+2}$ déterminées à la fin du paragraphe I pour trouver les éléments de V^{+2} pour la représentation (11)

$$[(11)V^{+2}_{q_1},\ (11)V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^q \sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ q_1 & q_1 & -q \end{pmatrix} (11)V^1_q(dd) \qquad (4)$$

$$[(11)V^{1}_{q_1},\ (11)V^{+2}_{q_2}] = \sum_q (-1)^q \sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} (11)V^{+2}_q$$

$$[(11)V^{1}_{q_1},\ (11)V^{1}_{q_2}] = \sum_q (-1)^{q+1} \sqrt{\tfrac{3}{5}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & -q \end{pmatrix} (11)V^1_q(dd) \ .$$

En comparant (4) et (1) on obtient immédiatement

$$\langle(11)1||V^{+2}||(11)1\rangle = \langle(11)2||V^{+2}||(11)2\rangle = 0$$

$$\langle(11)1||V^{+2}||(11)2\rangle = -\langle(11)2||V^{+2}||(11)1\rangle = -\sqrt{3} \quad .$$

A titre d'exemple cherchons quelques éléments de $(11|V^{+2}$ pour la représentation (22). La relation (1) donne :

$$[(11)2q_1,(22)00] = \sum_{\tau k q} (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & 0 & -q_1 \end{pmatrix} \langle(22)0||(11)V^{+2}||(22)\tau k\rangle$$

$$[(22)\tau kq] \qquad (5)$$

On a vu que

$$(11)2 = \sqrt{\frac{7}{15}}\, V^2(dd) + \frac{2}{\sqrt{15}}\, V^2(ds) + \frac{2}{\sqrt{15}}\, V^2(sd)$$

$$(22)0 = \frac{1}{\sqrt{6}}\, V^0(dd) - \sqrt{\frac{5}{6}}\, V^0(ss) \quad .$$

Le commutateur $[(11)2q_1,(22)00]$ s'écrit donc aussi

$$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{6\times15}}\,[V^2(dd),V^0(dd)] - \frac{\sqrt{7\times5}}{\sqrt{6\times15}}\,[V^2(dd),V^0(ss)]$$

$$\frac{2}{\sqrt{15\times6}}\,[V^2(ds),V^0(dd)] - \frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{6\times15}}\,[V^2(ds),V^0(ss)]$$

$$\frac{2}{\sqrt{15\times6}}\,[V^2(sd),V^0(dd)] - \frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{6\times15}}\,[V^2(sd),V^0(ss)] \quad .$$

Les relations (2) ont été explicitées au paragraphe I. On obtient :

$$[\ ,\ ] = \frac{2}{\sqrt{3\times5\times3\times2}}\,[(-1)^{q+1} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \{V^2(ds) - V^2(sd)\}]$$

$$- \frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{3\times5\times3\times2}}\,[(-1)^{q+1}\sqrt{5} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \{V^2(ds) - V^2(sd)\}] \qquad (6$$

$$= (-1)^{q+1} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}}\,(V^2(ds) - V^2(sd)) \frac{1}{\sqrt{5}} = (-1)^{q+1} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}}$$

En comparant (5) et (6) on en tire immédiatement

$$\langle (22)0 \| (11)V^{+2} \| (22)\tau k \rangle = 0 \quad \text{sauf} \quad \langle (22)0 \| (11)V^{+2} \| (22)2' \rangle = -\frac{4}{\sqrt{5}} \ .$$

En continuant ainsi on obtient finalement les résultats suivants :

$(11)V^{1}$	$(11)1$	$(11)2$
$(11)1$	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	0
$(11)2$	0	$\sqrt{3}$

$(11)V^{+2}$	$(11)1$	$(11)2$
$(11)1$	0	$-\sqrt{3}$
$(11)2$	$\sqrt{3}$	0

$(11)V^{1}$	$(22)0$	2	2'	3	4
$(22)0$	0				
2		$\sqrt{3}$			
2'			$\sqrt{3}$		
3				$\sqrt{\frac{42}{5}}$	
4					$3\sqrt{2}$

$(11)V^{+2}$	$(22)0$	2	2'	3	4
0	0	0	$-\frac{4}{\sqrt{5}}$	0	0
2	0	0	$-\sqrt{5}$	$-2\sqrt{2}$	
2'	$-\frac{4}{\sqrt{5}}$	$-\sqrt{5}$	0	0	$-2\sqrt{\frac{6}{5}}$
3	0	$2\sqrt{2}$	0	0	$-\sqrt{6}$
4	0	0	$-2\sqrt{\frac{6}{5}}$	$\sqrt{6}$	0

Vérifions les éléments de matrice des $(11)V^{k}$ ainsi trouvés.

On a : $G(\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{9}\left[\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_1\sigma_2 + 3\sigma_1 + 3\sigma_2\right]$

soit $G(11) = 1 \qquad G(22) = \frac{8}{3}$

et $G = \frac{5}{6}\left[V^{1}.V^{1} + V^{+2}.V^{+2}\right] = \frac{5}{6}\left[-\sqrt{3}\{V^{1}V^{1}\}^{0}_{0} + \sqrt{5}\{V^{+2}V^{+2}\}^{0}_{0}\right]$

$$\frac{5}{6} \langle (\sigma_1\sigma_2)\tau kq | -\sqrt{3}\{V^1 V^1\}^0_0 + \sqrt{5}\{V^{+2} V^{+2}\}^0_0 | (\sigma_1\sigma_2)\tau kq \rangle$$

$$= \frac{5}{6} \times (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k & 0 & k \\ -q & 0 & q \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \Big[\sum_{k''} (-1)^{k+k''} \langle (\sigma_1\sigma_2)k \| V^1 \| (\sigma_1\sigma_2)k'' \rangle$$

$$\langle (\sigma_1\sigma_2)k'' \| V^1 \| (\sigma_1\sigma_2)k \rangle + \sum_{k''} (-1)^{k+k''} \langle (\sigma_1\sigma_2)\tau k \| V^{+2} \| (\sigma_1\sigma_2)\tau'' k'' \rangle$$

$$\langle (\sigma_1\sigma_2)\tau'' k'' \| V^{+2} \| (\sigma_1\sigma_2)\tau k \rangle \Big]$$

On a aussi :

$$\langle (\sigma_1\sigma_2)\tau kq | G | (\sigma_1\sigma_2)\tau kq \rangle = (-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k & k & 0 \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \langle (\sigma_1\sigma_2)k \| G \| (\sigma_1\sigma_2)k \rangle$$

$$= G(\sigma_1\sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{[k]}} \langle \| G \| \rangle$$

Soit :

$$\langle \gamma k \| G \| \gamma k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2k+1}} \frac{5}{6} \Big[\sum_{k''} (-1)^{k+k''} \langle \gamma k \| V^1 \| \gamma k'' \rangle \langle \gamma k'' \| V^1 \| \gamma k \rangle$$

$$+ \sum_{k''} (-1)^{k+k''} \langle \gamma k \| V^{+2} \| \gamma k'' \rangle \langle \gamma k'' \| V^{+2} \| \gamma k \rangle \Big] \quad .$$

On peut vérifier que les résultats trouvés satisfont bien cette relation.

Service de Reprographie
C.N.R.S.
Gif